

EUROPEAN PATENT OFFICE

Patent Abstracts of Japan

PUBLICATION NUMBER : 11317289
PUBLICATION DATE : 16-11-99

APPLICATION DATE : 15-12-98
APPLICATION NUMBER : 10375443

$$\Phi[\lambda] = \Phi_1 + \sum_{i=1}^{p-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^{q-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^q \Phi_{i,i-1}$$

APPLICANT : TDK CORP;

INVENTOR : KOBORI ISAMU;

INT.CL. : H05B 33/12 H05B 33/14

TITLE : ORGANIC EL ELEMENT SIMULATION
METHOD, SIMULATION DEVICE, AND
ORGANIC EL ELEMENT

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \rho[\lambda]$$

II

ABSTRACT : PROBLEM TO BE SOLVED: To correctly estimate a spectrum emitted to the outside in optional structure, and make element design for obtaining a desirable spectrum possible by constituting with a luminescent source having a metal surface on one surface and a plurality of optical film thicknesses, and performing the structure design for taking out light based on a luminescent spectrum obtained from a simulation model represented by the numerical formula.

SOLUTION: Numerical expression I shows a layer having different refractive index of (q) kind on the metal surface side of a luminescent source and (p) kind on the opposite side and the whole associated wave $\phi[\lambda]$ comprising a reflecting wave ϕ_{nm} in incoming from an (n) layer to an (m) layer. [In formula I, λ is the wave length, $p > 1$, $q \geq 1$, amplitude of each light ϕ is represented by the specified expression.] Normalized modulation spectrum $\rho[\lambda]$ obtained from the composite wave of each light is represented by a specified expression, and when a luminescent source spectrum is $I_{PL}[\lambda]$, spectrum $I_{EL}[\lambda]$ emitted to the outside from a (p) layer is represented by an expression II. Spectrum estimation with a simulation model is quantitative and precise, calculation of element constitution such as film thickness is made possible, and the dispersion of spectroscopic characteristics is reduced.

COPYRIGHT: (C)1999,JPO

THIS PAGE BLANK (USPTO)

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平11-317289

(43) 公開日 平成11年(1999)11月16日

(51) Int.Cl.⁶

識別記号

F I

H 0 5 B 33/12

H 0 5 B 33/12

Z

33/14

33/14

A

審査請求 未請求 請求項の数 8 F D (全 23 頁)

(21) 出願番号 特願平10-375443

(22) 出願日 平成10年(1998)12月15日

(31) 優先権主張番号 特願平9-363196

(32) 優先日 平 9 (1997)12月15日

(33) 優先権主張国 日本 (J P)

(71) 出願人 000003067

ティーディーケイ株式会社

東京都中央区日本橋1丁目13番1号

(72) 発明者 小堀 勇

東京都中央区日本橋一丁目13番1号 ティー

ディーケイ株式会社内

(74) 代理人 弁理士 石井 陽一

(54) 【発明の名称】 有機EL素子のシミュレーション方法、シミュレーション装置および有機EL素子

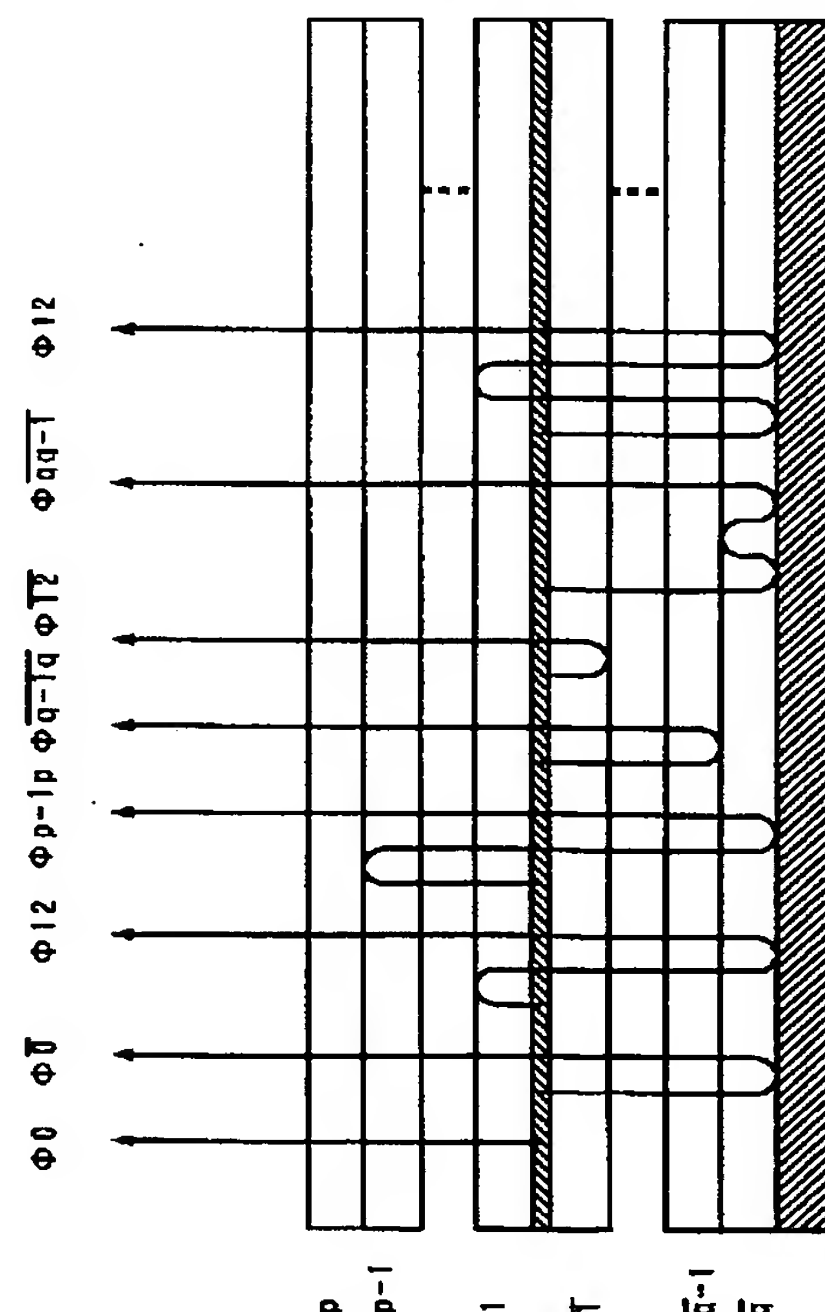
(57) 【要約】

【課題】 従来検討されていた以外の反射光を簡単に近似することで、一般的な任意の構造を有する有機EL素子から外部に放出されるスペクトルを正確に予測し、所望のスペクトルを得るための素子設計を可能にし、また、多くの反射面を有する構造でも効率的な光の取り出しが可能で、光学的なバラツキを低減できる素子構成を実現可能な有機EL素子のシミュレーション方法および装置を提供する。

【解決手段】 金属面以外での反射光を定量的に考慮し、対象とするデバイスは、屈折率の差が2倍以内の積層なので、金属面以外での反射は1回だけを考え、2回以上の反射は無視し、発光面は局在しているとして、それから非局在モデルへ拡張する。これにより、下記式で示されるような簡単な計算式で従来取り扱っていなかった反射波成分を取り扱うことにより正確なシミュレーションを可能にした。

【数63】

$$\Phi[\lambda] = \Phi_1 + \sum_{i=1}^{p-1} \Phi_{i,m+1} + \sum_{i=1}^{q-1} \Phi_{i,m+1} + \sum_{i=1}^q \Phi_{i,m+1}$$



【特許請求の範囲】

【請求項1】 一方の面に金属面を有し、発光源と複数の光学膜厚を有する有機EL素子のシミュレーション方法であって、

下記(I)で表されるシミュレーションモデルと、このシミュレーションモデル(I)より得られた発光スペクトルから光取り出しのための構造設計を行う有機EL素子のシミュレーション方法。

(I) 発光源の金属面側にq種、その反対側にp種の屈折率の異なる層を有する有機EL素子において、各界面での反射波 Φ_{nm} より構成される全合成波 $\Phi[\lambda]$ を、

【数1】

$$\Phi[\lambda] = \Phi_1 + \sum_{i=1}^{p-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^{q-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^q \Phi_{i,i-1}$$

(ここで、 λ は波長、 Φ_{nm} はn層からm層に入射したときの反射波、 $p > 1$ 、 $q \geq 1$ とする。ただし、pの層は干渉に寄与しないような十分に厚いガラスや雰囲気とし、 $q = 1$ の場合には右辺第3項は0とする。また、添え字の上に付してある-、つまりインバート記号は発光点より金属面側の層に関する量であることを表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から前方に放出され界面で反射されることなく放出される光と、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光との合成波 Φ_1 を、

【数2】

$$\Phi_1 = \Phi_0 + \Phi_{\bar{0}}$$

$$\Phi_{\bar{0}} = r_{q,m} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1q} = \sum_{t=1}^q \Delta_{\bar{t}}$$

$$r_{qm} = -k$$

$$\Delta_{\bar{t}} = d_{\bar{t}} n_{\bar{t}}$$

(ここで、 n_m : m層の屈折率、 Δ_m : m層の光路長、 r_{mn} : m層からn層に光波が入射する際の振幅反射率、 Φ : 光波の振幅、 ρ : 光波の振幅の2乗(エネルギー)、 L : 光路長、 λ : 波長、 d : 膜厚、 n : 屈折率を表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から前方に放出され、t層目の界面で反射された後、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【数3】

$$\Phi_{t,t+1} = r_{t,t+1} r_{q,m} \Phi_1 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{tq}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{tq} = \sum_{j=1}^q \Delta_j + \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1} = \frac{n_t - n_{t+1}}{n_t + n_{t+1}}$$

$$\Delta_{\bar{t}} = d_{\bar{t}} n_{\bar{t}}$$

$$\Delta_t = d_t n_t$$

と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から後方に放出され、t層目の界面で反射された後、前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【数4】

$$\Phi_{\bar{t},t+1} = r_{\bar{t},t+1} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1\bar{t}}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1\bar{t}} = \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{\bar{t},t+1} = \frac{n_{\bar{t}} - n_{t+1}}{n_{\bar{t}} + n_{t+1}}$$

と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい、t層目の界面で反射された後、さらに金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【数5】

$$\Phi_{\bar{t},t-1} = r_{\bar{t},t-1} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{t,q} = \sum_{j=t}^q \Delta_j$$

$$r_{\bar{t},t-1} = \frac{n_{\bar{t}} - n_{t-1}}{n_{\bar{t}} + n_{t-1}}$$

$$\Phi_{10} = \Phi_{11}$$

$$\Phi_{11} = r_{11} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$r_{11} = \frac{n_{\bar{1}} - n_1}{n_{\bar{1}} + n_1}$$

と表し、金属面での振幅反射率を $-k$ として、上記各光の合成波から得られる規格化された変調スペクトル $\rho[\lambda]$ を、

【数6】

$$\rho[\lambda] = \Phi[\lambda] \quad \Phi[\lambda]^*$$

$$\frac{\rho[\lambda]}{\Phi_0 \Phi_0^*} = \rho_1[\lambda] + \rho_2[\lambda] + \rho_3[\lambda] + \rho_4[\lambda]$$

$$\rho_1[\lambda] = \left(1 + k^2 + 2k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1,q}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_2[\lambda] = \rho_1[\lambda] \sum_{t=1}^{p-1} 2r_{t,t+1} \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\rho_3[\lambda] = \sum_{t=1}^{q-1} 2r_{t,t+1} \left(\cos \left[2\pi \frac{2L_{1,t}}{\lambda} \right] + k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1,q} + 2L_{1,t}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_4[\lambda] = \sum_{t=1}^q 2r_{t,t+1} \left(k^2 \cos \left[2\pi \frac{2L_{1,q} + 2L_{t,q}}{\lambda} \right] + k^3 \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} - \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

(ここで、*は複素数を表す。以下同)と表し、発光源のスペクトルを $I_{PL}[\lambda]$ と表したとき、光学的変調を受けて p 層(ガラス基板)を通して外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【数7】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \quad \rho[\lambda]$$

と表すシミュレーションモデル。

【請求項2】 請求項1の有機EL素子のシミュレーション方法であって、

前記シミュレーションモデル(I)において、さらに、視感度係数を $\theta[\lambda]$ と表したとき、

【数8】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \quad \theta[\lambda] d\lambda$$

で得られる発光輝度から光取り出しのための構造設計を行う有機EL素子のシミュレーション方法。

【請求項3】 請求項1または2の有機EL素子のシミュレーション方法であって、

前記シミュレーションモデル(I)において、発光が厚さ d_e の一定の厚みを有する発光層であって、この発光層中の任意の点である x 地点における再結合量を $\eta[x]$ とし、干渉による強度を $\rho[x, \lambda]$ としたときに、再結合量 $\eta[x]$ を発光強度分布 $\phi[x]$ で置換して干渉スペクトルを、

【数9】

$$\Gamma[\lambda] = \int_0^{d_e} \rho[x, \lambda] \quad \phi[x] \quad dx$$

と表し、これから外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【数10】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \quad \Gamma[\lambda]$$

と表し、輝度 L を

【数11】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \quad \theta[\lambda] \quad d\lambda$$

と表す請求項1または2の有機EL素子のシミュレーション方法。

【請求項4】 一方の面に金属面を有し、発光種と複数の光学膜厚を有する有機EL素子のシミュレーション装置であって、

下記(I)で表されるシミュレーションモデル(I)が展開されている制御プログラムと、

この制御プログラムにより制御され、発光スペクトラムを算出する演算手段を有する有機EL素子のシミュレーション装置。

(I) 金属面側に q 種、その反対側に p 種の屈折率の異なる層を有する有機EL素子において、

各界面での反射波 Φ_{nm} から構成されている全合成波 $\Phi[\lambda]$ を、

【数12】

$$\Phi[\lambda] = \Phi_1 + \sum_{i=1}^{p-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^{q-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^q \Phi_{i,i+1}$$

(ここで、 λ は波長、 Φ_{nm} は n 層から m 層に入射したときの反射波、 $p > 1$ 、 $q \geq 1$ とする。ただし、 p の層は干渉に寄与しないような十分に厚いガラスや雰囲気と

し、 $q = 1$ の場合には右辺第3項は0とする。また、添え字の上に付してある $-$ 、つまりインバート記号は発光点より金属面側の層に関する量であることを表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から前方に放出され界面で反射されることなく放出される光と、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光との合成波 Φ_1 を、

【数13】

$$\Phi_1 = \Phi_0 + \Phi_{\bar{0}}$$

$$\Phi_{\bar{0}} = r_{qm} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1q} = \sum_{i=1}^q \Delta_{\bar{i}}$$

$$r_{qm} = -k$$

$$\Delta_{\bar{i}} = d_{\bar{i}} n_{\bar{i}}$$

(ここで、 n_m : m層の屈折率、 Δ_m : m層の光路長、 r_{mn} : m層からn層に光波が入射する際の振幅反射率、 Φ : 光波の振幅、 ρ : 光波の振幅の2乗(エネルギー)、 L : 光路長、 λ : 波長、 d : 膜厚、 n : 屈折率を表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に含まれる、発光源から前方に放出され、t層目の界面で反射された後、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【数14】

$$\Phi_{t,t+1} = r_{t,t+1} r_{qm} \Phi_1 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{tq}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{tq} = \sum_{j=1}^q \Delta_j + \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1} = \frac{n_t - n_{t+1}}{n_t + n_{t+1}}$$

$$\Delta_{\bar{i}} = d_{\bar{i}} n_{\bar{i}}$$

$$\Delta_t = d_t n_t$$

と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に含まれる、発光源から後方に放出され、t層目の界面で反射された後、前方に向

$$\rho[\lambda] = \Phi[\lambda] \Phi[\lambda]^*$$

$$\frac{\rho[\lambda]}{\Phi_0 \Phi_0^*} = \rho_1[\lambda] + \rho_2[\lambda] + \rho_3[\lambda] + \rho_4[\lambda]$$

$$\rho_1[\lambda] = \left(1 + k^2 + 2k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_2[\lambda] = \rho_1[\lambda] \sum_{t=1}^{p-1} 2r_{t,t+1} \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{tq}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\rho_3[\lambda] = \sum_{t=1}^{q-1} 2r_{t,t+1} \left(\cos \left[2\pi \frac{2L_{1\bar{i}}}{\lambda} \right] + k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1q} + 2L_{1\bar{i}}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_4[\lambda] = \sum_{t=1}^q 2r_{t,t+1} \left(k^2 \cos \left[2\pi \frac{2L_{1q} + 2L_{tq}}{\lambda} \right] + k^3 \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{tq}}{\lambda} - \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【数15】

$$\Phi_{t,t+1} = r_{t,t+1} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1\bar{i}}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1\bar{i}} = \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1} = \frac{n_{\bar{i}} - n_{t+1}}{n_{\bar{i}} + n_{t+1}}$$

と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に含まれる、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい、t層目の界面で反射された後、さらに金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【数16】

$$\Phi_{t,t-1} = r_{t,t-1} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{tq}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{tq} = \sum_{j=t}^q \Delta_j$$

$$r_{t,t-1} = \frac{n_{\bar{i}} - n_{t-1}}{n_{\bar{i}} + n_{t-1}}$$

$$\Phi_{10} = \Phi_{11}$$

$$\Phi_{11} = r_{11} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$r_{11} = \frac{n_{\bar{i}} - n_1}{n_{\bar{i}} + n_1}$$

と表し、上記各光の合成波から得られる変調スペクトル $\rho[\lambda]$ を、

【数17】

(ここで、*は複素数を表す。以下同)と表し、発光源のスペクトルを $I_{PL}[\lambda]$ と表したとき、光学の変調を受けてp層(ガラス基板)を通して外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【数18】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \rho[\lambda]$$

と表すシミュレーションモデル。(上記式中、 n_m : m層の屈折率、 Δ_m : m層の光路長、 r_{mn} : m層からn層に光波が入射する際の振幅反射率、 Φ : 光波の振幅、 ρ : 光波の振幅の2乗(エネルギー)、 L : 光路長、 λ : 波長、 d : 膜厚、 n : 屈折率を表す。)

【請求項5】 請求項4の有機EL素子のシミュレーション装置であって、シミュレーションモデル(I)において、さらに、視感度係数を $\theta[\lambda]$ と表したとき、

【数19】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

として発光輝度を算出する有機EL素子のシミュレーション装置。

【請求項6】 請求項4または5の有機EL素子のシミュレーション装置であって、前記シミュレーションモデル(I)において、発光が厚さ d_e の一定の厚みを有する発光層であって、この発光層中の任意の点であるx地点における再結合量を $\eta[x]$ とし、干渉による強度を $\rho[x, \lambda]$ としたときに、再結合量 $\eta[x]$ を発光強度分布 $\phi[x]$ で置換して干渉スペクトルを、

【数20】

$$\Gamma[\lambda] = \int_0^{d_e} \rho[x, \lambda] \phi[x] dx$$

と表し、これから外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【数21】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \Gamma[\lambda]$$

と表し、輝度Lを

【数22】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

と表す有機EL素子のシミュレーション装置。

【請求項7】 ガラス基板(屈折率: $n=1.5$ 以下)と、ホール注入電極(屈折率: $n=1.8 \sim 2.1$)と、有機層(屈折率: $n=1.7 \sim 2.1$)と、電子注入電極(300~700nmの波長域での反射率50%以上)を順次有し、前記ホール注入電極と有機層の光学膜厚($n \times$ 膜厚)の合計を 1.9×200 nm以下として、輝度のバラツキを $\pm 5\%$ 以内とした有機EL素子。

【請求項8】 ガラス基板(屈折率: $n=1.5$ 以下)と、バッファ層(屈折率: $n=1.8 \sim 2.1$)と、ホール注入電極(屈折率: $n=1.8 \sim 2.1$)と、有機層(屈折率: $n=1.7 \sim 2.1$)と、電子注入電極(300~700nmの波長域での反射率50%以上)を順次有し、

前記ホール注入電極と、バッファ層と、有機層との光学膜厚($n \times$ 膜厚)の合計を 1.9×700 nm以上として、輝度のバラツキを $\pm 5\%$ 以内とした有機EL素子。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】 本発明は、有機化合物を用いた有機EL素子に関し、さらに詳細には、発光を有効に取り出すことができ発光輝度のバラツキの少ない有機EL素子を提供するためのシミュレーション方法と装置および有機EL素子に関する。

【0002】

【従来の技術】 近年、有機EL素子が盛んに研究されている。これは、ホール注入電極上にトリフェニルジアミン(TPD)などのホール輸送材料を蒸着により薄膜とし、さらにアルミキノリノール錯体(Alq_3)などの蛍光物質を発光層として積層し、さらにMgなどの仕事関数の小さな金属電極(電子注入電極)を形成した基本構成を有する素子で、10V前後の電圧で数100から数10,000cd/m²ときわめて高い輝度が得られることで注目されている。

【0003】 有機EL素子は、前述のように基板上に電子注入電極、有機層、ホール注入電極等を有する有機EL構造体が成膜されている基本構成を有し、通常、発光した光はホール注入電極を介して基板側から取り出される。

【0004】 ところで、一般に有機EL素子では、発光種の発光スペクトルは外部に出る間に素子内部で光学的な干渉を起こし、変調されることが知られている。このため、同一の発光材料を持つ有機EL素子であっても、光学系が異なれば外部に発光されるスペクトルやその強度が変化してしまう。

【0005】 この光学変調の最も大きなものとしては、特開平4-328295号公報に開示されているように、前方に発光された光と、後方に発光され金属面(電子注入電極)で反射した光との干渉によるものである。この効果は、発光点と金属面との距離で決まる関数で表せるので、所望の変調スペクトルを得るための光学的構成がわかる。しかし、さらに精密な予想を行う場合には誤差が大きく、これでも不十分であり、さらに考慮すべきパラメータを必要としていた。

【0006】 さらに、特開平7-240277号公報において、ガラス/透明電極界面での反射光が干渉して有機EL素子の発光光を変調するという問題が明らかになった。しかし、同公報中にはある狭い範囲の特定波長の

発光強度を、光学変調を利用して強くするためには、ガラス／透明導電膜界面と有機多層部を挟む金属面までの光学膜厚を特定の値にすればよいことが述べられているにすぎない。

【0007】ある任意の光学系があったとき、上記したパラメータ以外の干渉により、どの程度変調されるのかが予想できなくては、スペクトル変調についての詳細な検討は困難であり、素子のさらなる最適化への光学設計を困難にしていた。また、さらに複雑になった場合、例えば、有機多層部と透明導電膜以外での更に多くの反射界面が存在する場合の影響も考慮されておらず、その利用についての検討もない。

【0008】上述のように、有機EL素子の構成膜厚が変わると外部に発せられる光のスペクトルや輝度が変化する。ディスプレイ等の表示デバイスとして使用するには、それに起因する特性のバラツキは小さいことが望ましい。しかし、これまでどの程度まで光学膜厚を制御すればよいのか議論されたことがなかった。従って、そのバラツキを小さくすることが困難であり、均一な製品を供給することを困難にしていた。

【0009】

【発明が解決しようとする課題】本発明の目的は、従来検討されていた以外の反射光を簡単に近似することで、一般的な任意の構造を有する有機EL素子から外部に放出されるスペクトルを正確に予測し、所望のスペクトルを得るための素子設計を可能にする有機EL素子のシミュレーション方法および装置を提供することである。

【0010】また、多くの反射面を有する構造でも効率的な光の取り出しが可能な構造を実現可能な有機EL素子のシミュレーション方法および装置を提供することである。

【0011】また、光学的なバラツキを低減できる素子構成を実現可能な有機EL素子のシミュレーション方法および装置を提供することである。

【0012】また、シミュレーションの結果から、光学的なバラツキを低減できる素子構成とした有機EL素子を提供することである。

【0013】

【課題を解決するための手段】本発明者は、正確なシミュレーションモデルを確立すべく種々の検討を行った。そのための手法として、(1) 金属面以外での反射光を定量的に考慮する。(2) 対象とするデバイスは、屈折率の差が2倍以内の積層なので、金属面以外での反射は1回だけを考え、2回以上の反射は無視する。(3) 発光面は局在しているとし、それから非局在モデルへ拡張した。

【0014】すなわち、本発明は以下の構成により達成される。

(1) 一方の面に金属面を有し、発光源と複数の光学膜厚を有する有機EL素子のシミュレーション方法であ

って、下記(I)で表されるシミュレーションモデルと、このシミュレーションモデル(I)より得られた発光スペクトルから光取り出しのための構造設計を行う有機EL素子のシミュレーション方法。

(I) 発光源の金属面側にq種、その反対側にp種の屈折率の異なる層を有する有機EL素子において、各界面での反射波 Φ_{nm} より構成される全合成波 $\Phi[\lambda]$ を、

【0015】

【数23】

$$\Phi[\lambda] = \Phi_1 + \sum_{i=1}^{p-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^{q-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^q \Phi_{i,i+1}$$

【0016】(ここで、 λ は波長、 Φ_{nm} はn層からm層に入射したときの反射波、 $p > 1$ 、 $q \geq 1$ とする。ただし、pの層は干渉に寄与しないような十分に厚いガラスや雰囲気とし、 $q = 1$ の場合には右辺第3項は0とする。また、添え字の上に付してある一、つまりインバート記号は発光点より金属面側の層に関する量であることを表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から前方に放出され界面で反射されることなく放出される光と、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光との合成波 Φ_1 を、

【0017】

【数24】

$$\Phi_1 = \Phi_0 + \Phi_0^-$$

$$\Phi_0^- = r_{q,m}^- \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1q} = \sum_{i=1}^q \Delta_i^-$$

$$r_{q,m}^- = -k$$

$$\Delta_i^- = d_i^- n_i^-$$

【0018】(ここで、 n_m : m層の屈折率、 Δ_m : m層の光路長、 r_{mn} : m層からn層に光波が入射する際の振幅反射率、 Φ : 光波の振幅、 ρ : 光波の振幅の2乗(エネルギー)、 L : 光路長、 λ : 波長、 d : 膜厚、 n : 屈折率を表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から前方に放出され、t層目の界面で反射された後、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0019】

【数25】

$$\Phi_{t,t+1} = r_{t,t+1} r_{q,m} \Phi_1 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{t,q} = \sum_{j=1}^q \Delta_j + \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1} = \frac{n_t - n_{t+1}}{n_t + n_{t+1}}$$

$$\Delta_{\bar{t}} = d_{\bar{t}} n_{\bar{t}}$$

$$\Delta_t = d_t n_t$$

【0020】と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から後方に放出され、 t 層目の界面で反射された後、前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0021】

【数26】

$$\Phi_{t,t+1} = r_{t,t+1} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{t,i}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{t,i} = \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1} = \frac{n_{\bar{t}} - n_{t+1}}{n_{\bar{t}} + n_{t+1}}$$

【0022】と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、

$$\rho[\lambda] = \Phi[\lambda] \Phi[\lambda]^*$$

$$\frac{\rho[\lambda]}{\Phi_0 \Phi_0^*} = \rho_1[\lambda] + \rho_2[\lambda] + \rho_3[\lambda] + \rho_4[\lambda]$$

$$\rho_1[\lambda] = \left(1 + k^2 + 2k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_2[\lambda] = \rho_1[\lambda] \sum_{i=1}^{p-1} 2r_{t,t+1} \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\rho_3[\lambda] = \sum_{i=1}^{q-1} 2r_{t,t+1} \left(\cos \left[2\pi \frac{2L_{t,i}}{\lambda} \right] + k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} + \frac{2L_{t,i}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_4[\lambda] = \sum_{i=1}^q 2r_{t,t+1} \left(k^2 \cos \left[2\pi \frac{2L_{t,q}}{\lambda} + 2L_{t,q} \right] + k^3 \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} - \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

【0026】(ここで、*は複素数を表す。以下同)と表し、発光源のスペクトルを $I_{PL}[\lambda]$ と表したとき、光学的変調を受けて p 層(ガラス基板)を通して外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【0027】

【数29】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \rho[\lambda]$$

発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい、 t 層目の界面で反射された後、さらに金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0023】

【数27】

$$\Phi_{t,t-1} = r_{t,t-1} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{t,q} = \sum_{j=t}^q \Delta_j$$

$$r_{t,t-1} = \frac{n_{\bar{t}} - n_{t-1}}{n_{\bar{t}} + n_{t-1}}$$

$$\Phi_{10} = \Phi_{11}$$

$$\Phi_{11} = r_{11} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1,q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$r_{11} = \frac{n_{\bar{1}} - n_1}{n_{\bar{1}} + n_1}$$

【0024】と表し、金属面での振幅反射率を $-k$ として、上記各光の合成波から得られる規格化された変調スペクトル $\rho[\lambda]$ を、

【0025】

【数28】

【0028】と表すシミュレーションモデル。

(2) 上記(1)の有機EL素子のシミュレーション方法であって、前記シミュレーションモデル(1)において、さらに、視感度係数を $\theta[\lambda]$ と表したとき、

【0029】

【数30】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

【0030】で得られる発光輝度から光取り出しのための構造設計を行う有機EL素子のシミュレーション方法。

(3) 上記(1)または(2)の有機EL素子のシミュレーション方法であって、前記シミュレーションモデル(I)において、発光が厚さ d_e の一定の厚みを有する発光層であって、この発光層中の任意の点である x 地点における再結合量を $\eta[x]$ とし、干渉による強度を $\rho[x, \lambda]$ としたときに、再結合量 $\eta[x]$ を発光強度分布 $\phi[x]$ で置換して干渉スペクトルを、

【0031】

【数31】

$$\Gamma[\lambda] = \int_0^{d_e} \rho[x, \lambda] \phi[x] dx$$

【0032】と表し、これから外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【0033】

【数32】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \Gamma[\lambda]$$

【0034】と表し、輝度 L を

【0035】

【数33】

$$L = \int_0^{\infty} I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

【0036】と表す上記(1)または(2)の有機EL素子のシミュレーション方法。

(4) 一方の面に金属面を有し、発光種と複数の光学膜厚を有する有機EL素子のシミュレーション装置であって、下記(I)で表されるシミュレーションモデル(I)が展開されている制御プログラムと、この制御プログラムにより制御され、発光スペクトラムを算出する演算手段を有する有機EL素子のシミュレーション装置。

(I) 金属面側に q 種、その反対側に p 種の屈折率の異なる層を有する有機EL素子において、各界面での反射波 Φ_{nm} から構成されている全合成波 $\Phi[\lambda]$ を、

【0037】

【数34】

$$\Phi[\lambda] = \Phi_1 + \sum_{i=1}^{p-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^{q-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^q \Phi_{i,i-1}$$

【0038】(ここで、 λ は波長、 Φ_{nm} は n 層から m 層に入射したときの反射波、 $p > 1$ 、 $q \geq 1$ とする。ただし、 p の層は干渉に寄与しないような十分に厚いガラスや雰囲気とし、 $q = 1$ の場合には右辺第3項は0とする。また、添え字の上に付してある $-$ 、つまりインバート記号は発光点より金属面側の層に関する量であることを表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に含まれる、発光源から前方に放出され界面で反射されることな

く放出される光と、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光との合成波 Φ_1 を、

【0039】

【数35】

$$\Phi_1 = \Phi_0 + \Phi_{\bar{0}}$$

$$\Phi_{\bar{0}} = r_{q,m} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{\bar{1q}}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{\bar{1q}} = \sum_{i=1}^q \Delta_{\bar{i}}$$

$$r_{qm} = -k$$

$$\Delta_{\bar{i}} = d_{\bar{i}} n_{\bar{i}}$$

【0040】(ここで、 n_m : m 層の屈折率、 Δ_m : m 層の光路長、 r_{mn} : m 層から n 層に光波が入射する際の振幅反射率、 Φ : 光波の振幅、 ρ : 光波の振幅の2乗(エネルギー)、 L : 光路長、 λ : 波長、 d : 膜厚、 n : 屈折率を表す。以下同)と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に含まれる、発光源から前方に放出され、 t 層目の界面で反射された後、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0041】

【数36】

$$\Phi_{t,t+1} = r_{t,t+1} r_{q,m} \Phi_1 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{tq}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{tq} = \sum_{j=1}^q \Delta_j + \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1} = \frac{n_t - n_{t+1}}{n_t + n_{t+1}}$$

$$\Delta_{\bar{i}} = d_{\bar{i}} n_{\bar{i}}$$

$$\Delta_i = d_i n_i$$

【0042】と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に含まれる、発光源から後方に放出され、 t 層目の界面で反射された後、前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0043】

【数37】

$$\Phi_{t,t+1}^- = r_{t,t+1}^- \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1,i}^-}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1,i}^- = \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1}^- = \frac{n_t^- - n_{t+1}^-}{n_t^- + n_{t+1}^-}$$

【0046】と表し、上記各光の合成波から得られる変調スペクトル $\rho[\lambda]$ を、

【0047】

【数39】

【0044】と表し、全合成波 $\Phi[\lambda]$ 中に包含される、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい、 t 層目の界面で反射された後、さらに金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0045】

【数38】

$$\Phi_{t,t-1}^- = r_{t,t-1}^- \Phi_0 r_{qm}^- \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{t,q}^-}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{t,q}^- = \sum_{j=t}^q \Delta_j$$

$$r_{t,t-1}^- = \frac{n_t^- - n_{t-1}^-}{n_t^- + n_{t-1}^-}$$

$$\Phi_{10}^- = \Phi_{11}^-$$

$$\Phi_{11}^- = r_{11}^- \Phi_0 r_{qm}^- \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1,q}^-}{\lambda} \right) \right]$$

$$r_{11}^- = \frac{n_1^- - n_1}{n_1^- + n_1}$$

$$\rho[\lambda] = \Phi[\lambda] \Phi[\lambda]^*$$

$$\frac{\rho[\lambda]}{\Phi_0 \Phi_0^*} = \rho_1[\lambda] + \rho_2[\lambda] + \rho_3[\lambda] + \rho_4[\lambda]$$

$$\rho_1[\lambda] = \left(1 + k^2 + 2k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1,q}^-}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_2[\lambda] = \rho_1[\lambda] \sum_{t=1}^{p-1} 2r_{t,t+1}^- \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}^-}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\rho_3[\lambda] = \sum_{t=1}^{q-1} 2r_{t,t+1}^- \left(\cos \left[2\pi \frac{2L_{1,i}^-}{\lambda} \right] + k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1,q}^- + 2L_{1,i}^-}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_4[\lambda] = \sum_{t=1}^q 2r_{t,t+1}^- \left(k^2 \cos \left[2\pi \frac{2L_{1,q}^- + 2L_{t,q}^-}{\lambda} \right] + k^3 \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}^-}{\lambda} - \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

【0048】（ここで、*は複素数を表す。以下同）と表し、発光源のスペクトルを $I_{PL}[\lambda]$ と表したとき、光学的変調を受けて p 層（ガラス基板）を通して外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【0049】

【数40】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \rho[\lambda]$$

【0050】と表すシミュレーションモデル。(上記式中、 n_m : m層の屈折率、 Δ_m : m層の光路長、 r_{mn} : m層からn層に光波が入射する際の振幅反射率、 Φ : 光波の振幅、 ρ 光波の振幅の2乗(エネルギー)、 L : 光路長、 λ : 波長、 d : 膜厚、 n : 屈折率を表す。)

(5) 上記(4)の有機EL素子のシミュレーション装置であって、シミュレーションモデル(I)において、さらに、視感度係数を $\theta[\lambda]$ と表したとき、

【0051】

【数41】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

【0052】として発光輝度を算出する有機EL素子のシミュレーション装置。

(6) 上記(4)または(5)の有機EL素子のシミュレーション装置であって、前記シミュレーションモデル(I)において、発光が厚さ d_e の一定の厚みを有する発光層であって、この発光層中の任意の点である x 地点における再結合量を $\eta[x]$ とし、干渉による強度を $\rho[x, \lambda]$ としたときに、再結合量 $\eta[x]$ を発光強度分布 $\phi[x]$ で置換して干渉スペクトルを、

【0053】

【数42】

$$\Gamma[\lambda] = \int_0^{d_e} \rho[x, \lambda] \phi[x] dx$$

【0054】と表し、これから外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【0055】

【数43】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \Gamma[\lambda]$$

【0056】と表し、輝度 L を

【0057】

【数44】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

【0058】と表す有機EL素子のシミュレーション装置。

(7) ガラス基板(屈折率: $n=1.5$ 以下)と、ホール注入電極(屈折率: $n=1.8 \sim 2.1$)と、有機層(屈折率: $n=1.7 \sim 2.1$)と、電子注入電極(300~700nmの波長域での反射率50%以上)を順次有し、前記ホール注入電極と有機層の光学膜厚($n \times$ 膜厚)の合計を 1.9×200 nm以下として、輝度のバラツキを $\pm 5\%$ 以内とした有機EL素子。

(8) ガラス基板(屈折率: $n=1.5$ 以下)と、バッファ層(屈折率: $n=1.8 \sim 2.1$)と、ホール注入電極(屈折率: $n=1.8 \sim 2.1$)と、有機層(屈折率: $n=1.7 \sim 2.1$)と、電子注入電極(300~700nmの波長域での反射率50%以上)を順次有

し、前記ホール注入電極と、バッファ層と、有機層との光学膜厚($n \times$ 膜厚)の合計を 1.9×700 nm以上として、輝度のバラツキを $\pm 5\%$ 以内とした有機EL素子。

【0059】

【作用】本発明のシミュレーションモデルである論理式を、後述のようにA1q3を有する有機EL素子に適用し、実験値と比較したところ、発光スペクトルおよび輝度共に実験値とよく一致した。このように、スペクトルを定量的にかつ精密に予測することが可能となった。また、多くの反射面があるような複雑な場合にも、効率的な光の取り出し構造を決定することができる。

【0060】さらに、上記で得られたシミュレーション結果をもとに、素子の膜厚からくる分光学的な特性バラツキを抑制するための素子構成を計算した。例えば、有機EL素子の場合には、ガラスと金属面の間に光路長の十分長い層(500nm以上)を設けるか、膜厚分布を ± 10 nm程度以内に抑えればよいことを見出した。

【0061】

【発明の実施の形態】本発明の有機EL素子のシミュレーション方法は、一方の面に金属面を有し、発光源と複数の光学膜厚を有する有機EL素子のシミュレーション方法であって、下記(I)で表されるシミュレーションモデルと、このシミュレーションモデル(I)より得られた発光スペクトルから効率的な光取り出しのための構造設計を行うものである。

【0062】(I) 例えば図1に示すような、金属面側に q 種、その反対側に p 種の屈折率の異なる層を有する有機EL素子において、各界面での反射波を、

【0063】

【数45】

$$\Phi[\lambda] = \Phi_1 + \sum_{i=1}^{p-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^{q-1} \Phi_{i,i+1} + \sum_{i=1}^q \Phi_{i,i+1}$$

【0064】(ここで、 λ は波長、 Φ_{nm} は n 層から m 層に入射したときの反射波、 $p > 1$ 、 $q \geq 1$ とする。ただし、 p の層は干渉に寄与しないような十分に厚いガラスや雰囲気とし、 $q=1$ の場合には右辺第3項は0とする。また、添え字の上に付してある $-$ 、つまりインバート記号は発光点より金属面側の層に関する量であることを表す。以下同)と表し、発光源から前方に放出され界面で反射されることなく放出される光と、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光とを、

【0065】

【数46】

$$\Phi_1 = \Phi_0 + \Phi_{\bar{0}}$$

$$\Phi_{\bar{0}} = r_{q,m} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1q} = \sum_{i=1}^q \Delta_{\bar{i}}$$

$$r_{qm} = -k$$

$$\Delta_{\bar{i}} = d_{\bar{i}} n_{\bar{i}}$$

【0066】(ここで、 n_m : m層の屈折率、 Δ_m : m層の光路長、 r_{mn} : m層からn層に光波が入射する際の振幅反射率、 Φ : 光波の振幅、 ρ : 光波の振幅の2乗(エネルギー)、 L : 光路長、 λ : 波長、 d : 膜厚、 n : 屈折率を表す。以下同)と表し、発光源から前方に放出され、t層目の界面で反射された後、金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0067】

【数47】

$$\Phi_{t,t+1} = r_{t,t+1} r_{q,m} \Phi_1 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{tq}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{tq} = \sum_{j=1}^q \Delta_{\bar{j}} + \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{t,t+1} = \frac{n_t - n_{t+1}}{n_t + n_{t+1}}$$

$$\Delta_{\bar{i}} = d_{\bar{i}} n_{\bar{i}}$$

$$\Delta_i = d_i n_i$$

【0068】と表し、発光源から後方に放出され、t層目の界面で反射された後、前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0069】

【数48】

$$\Phi_{\bar{t},t+1} = r_{\bar{t},t+1} \Phi_0 \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1,\bar{i}}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{1,\bar{i}} = \sum_{j=1}^t \Delta_j$$

$$r_{\bar{t},t+1} = \frac{n_{\bar{t}} - n_{t+1}}{n_{\bar{t}} + n_{t+1}}$$

【0070】と表し、発光源から後方に放出され、金属面で反射して前方に向かい、t層目の界面で反射された後、さらに金属面で反射して前方に向かい他の界面で反射されることなく放出される光を、

【0071】

【数49】

$$\Phi_{\bar{t},t-1} = r_{\bar{t},t-1} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$L_{t,q} = \sum_{j=t}^q \Delta_j$$

$$r_{\bar{t},t-1} = \frac{n_{\bar{t}} - n_{t-1}}{n_{\bar{t}} + n_{t-1}}$$

$$\Phi_{10} = \Phi_{11}$$

$$\Phi_{11} = r_{11} \Phi_0 r_{qm} \exp \left[2\pi i \left(\frac{2L_{1,q}}{\lambda} \right) \right]$$

$$r_{11} = \frac{n_{\bar{1}} - n_1}{n_{\bar{1}} + n_1}$$

【0072】と表し、金属面での振幅反射率を $-k$ として、上記各光の合成波から得られる変調スペクトル $\rho[\lambda]$ を、

【0073】

【数50】

$$\rho[\lambda] = \Phi[\lambda] \cdot \Phi[\lambda]^*$$

$$\frac{\rho[\lambda]}{\Phi_0 \Phi_0^*} = \rho_1[\lambda] + \rho_2[\lambda] + \rho_3[\lambda] + \rho_4[\lambda]$$

$$\rho_1[\lambda] = \left(1 + k^2 + 2k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1,q}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_2[\lambda] = \rho_1[\lambda] \sum_{i=1}^{p-1} 2r_{i,t+1} \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right]$$

$$\rho_3[\lambda] = \sum_{i=1}^{q-1} 2r_{i,t+1} \left(\cos \left[2\pi \frac{2L_{1,t}}{\lambda} \right] + k \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{1,q}}{\lambda} + \frac{2L_{1,t}}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

$$\rho_4[\lambda] = \sum_{i=1}^q 2r_{i,t+1} \left(k^2 \cos \left[2\pi \frac{2L_{1,q}}{\lambda} + \frac{2L_{t,q}}{\lambda} \right] + k^3 \cos \left[2\pi \left(\frac{2L_{t,q}}{\lambda} - \frac{1}{2} \right) \right] \right)$$

【0074】（ここで、*は複素数を表す。以下同）と表し、発光源のスペクトルを $I_{PL}[\lambda]$ と表したとき、p層（ガラス基板）を通して外部に放出されるスペクトル $I_{EL}[\lambda]$ を、

【0075】

【数51】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \cdot \rho[\lambda]$$

【0076】と表すシミュレーションモデルである。

【0077】このようなシミュレーションモデルを用い、今まで考えられていた発光源からの直接放射光と、金属面を介して放出されていた反射光の他に、複数の屈折率の異なる界面での反射を考慮したシミュレーションを行うことができ、変調スペクトル強度を比較的容易に得ることができる。また、上記シミュレーションモデルでは一回反射光のみを考慮し、全界面の反射光を考慮した合成光波 $\Phi[\lambda]$ は、これらを単純に重ね合わせることにより得ている。これにより、モデルが単純化し、複雑な計算を行うことなく、比較的容易に精度のよい近似モデルを得ることができる。従って、上記シミュレーションモデルにおいては、rの2次以上を含む項は、1に比べて十分小さくなるので無視し、指数関数と三角関数との変換式も併用した。

【0078】またさらに、視感度係数を $\theta[\lambda]$ と表したとき、

【0079】

【数52】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \cdot \theta[\lambda] d\lambda$$

【0080】として得られる発光輝度から効率的な光取り出しのための構造設計を行うことができる。

【0081】上記シミュレーションモデルにおいては、発光源を広がりのない点源として扱った。そこで、さらに一般化するために、発光領域が分布を有する場合につ

いて考える。有機EL素子では一般に、発光源は互いに関係のない点光源の集合として捕らえることができる。従って、上記局在モデルを単に重ね合わせればよいことがわかる。

【0082】ただし、上記モデルを自然に拡張するため、例えば図2に示すように、一定の厚さ d_0 を有する発光層を考えると、局在発光 a を挟んで上下に発光領域 $d_1 + d_{-1}$ （この段落において、 -1 は1の上に $-$ を付したインバートを表す。）が存在するとする。双方の屈折率 $n_1 = n_{-1}$ とすると、 d_1 あるいは d_{-1} （いずれかが、 $0 \sim d_0$ までの任意の広がりがあることになる）は、 $0 \sim d_0$ までの局在発光が重ね合わさっていると考えることができる。

【0083】ここでは、点光源の発光強度は場所では変化するが、そのスペクトル（有機EL素子の場合蛍光スペクトル等）は発光ポイントでは同一であるとする。例えば、有機EL素子の場合には発光強度は電子と正孔の再結合量に比例する。再結合量は、デバイス内で分布を持つが、そのスペクトル自体は材料の蛍光スペクトル等と同一となるため場所には依存しない。このような条件で干渉スペクトルを求めるには、デバイス中の任意の点である x 地点における再結合量 $\eta[x]$ がわかっていなければならない。 x 地点から放出された光は、干渉により $\rho[x, \lambda]$ の強度になるので、 $\eta[x]$ に $\rho[x, \lambda]$ を乗じて発光領域にわたって x で積分すれば干渉スペクトル $\Gamma[\lambda]$ が得られることになる。なお、上述のように電子と正孔の再結合量は発光強度に比例するので、ここでは再結合量 $\eta[x]$ を発光強度分布 $\phi[x]$ で置換する。

【0084】

【数53】

$$\Gamma[\lambda] = \int_0^{d_0} \rho[x, \lambda] \cdot \phi[x] dx$$

【0085】上述のように、 $n_1 = n_{-1}$ （この段落において、 -1 は1の上に $-$ を付したインバートを表す。）で

あって、 $d_1 + d_{-1} = d_e$ であるから発光層の端を0と
おくと、 $d_{-1} = 0 \sim d_e$ の積分になる。

$$\Gamma[\lambda] = \int_0^{d_e} \rho[d_{-1}, \lambda] \phi[d_{-1}] dd_{-1} \quad \begin{cases} d_{-1} + d_1 = d_e = \text{一定} \\ n_{-1} = n_1 \end{cases}$$

【0087】従って、外部に放出されるスペクトルは、
【0088】
【数55】

$$I_{EL}[\lambda] = I_{PL}[\lambda] \Gamma[\lambda]$$

【0089】発光輝度は、
【0090】
【数56】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

【0091】となる。

【0092】上記検討において、発光点源のスペクトル
(有機ELの蛍光スペクトル)は発光ポイントで同一と
したが、発光点により異なる場合には上記の式は変更を
受ける。

【0093】発光領域の端(電子注入電極側=0)か
ら、 $d-1$ の距離の有機EL素子の発光強度を $I_{PL}[d-1, \lambda]$ とすれば、 $I_{EL}[\lambda]$ は、次のような積分式
になる(この段落において、 -1 は1の上に $-$ を付したイ
ンバートを表す。)。

【0094】
【数57】

$$I_{EL}[\lambda] = \int_0^{d_e} \rho[d_{-1}, \lambda] \phi[d_{-1}] I_{PL}[d_{-1}, \lambda] dd_{-1}$$

【0095】さらに、視感度係数を θ とすれば、輝度 L
は次のようになる。

【0096】
【数58】

$$L = \int_0^\infty I_{EL}[\lambda] \theta[\lambda] d\lambda$$

【0097】さらに、本発明の方法で用いたシミュレ
ーションモデル(1)を、制御アルゴリズムの一部として
プログラム上に展開し、これを演算手段に実行させるこ
とにより、発光スペクトル、発光輝度を得るシミュレ
ーション装置としてもよい。

【0098】上記シミュレーションモデルを展開するた
めのプログラムは、アセンブラ、C言語、フォートラ
ン、BASIC等の高級あるいは低級な言語を問わず、
上記シミュレーションモデルが展開可能な言語であれば
よい。その展開手段も、通常用いられている数式を展開
するための手法を応用すればよい。

【0099】プログラムを格納するための媒体として
は、ROM、RAM、フラッシュメモリー等の半導体メ
モリーの他に、FD、HD等の磁気記録媒体、CD、C
DROM等の光記録媒体等が挙げられる。

【0086】
【数54】

【0100】演算手段としては、プログラムが格納され
た半導体メモリーなどを直接アクセスして動作すること
の可能なマイクロプロセッサや、これを応用したパソ
コン等が挙げられ、演算結果は周知の制御手段やOS等
によりディスプレイ、プリンターに表示させることがで
きる。パラメータなどの入力もキーボード、外部との接
続バス、通信手段等を介して入力すればよい。従って、
例えば汎用のパソコン、ワークステーション等に上記シ
ミュレーションモデルを展開したプログラムを入力する
ことにより、本発明装置を実現することができる。

【0101】次に本発明のシミュレーションにより解析
される有機EL素子について説明する。本発明に用いら
れる有機EL素子は、例えば、基板上にホール注入電極
と、電子注入電極と、これらの電極間に設けられた1種
以上の有機層とを有する。有機層は、それぞれ少なくと
も1層のホール輸送層および発光層を有し、その上に電
子注入電極を有し、さらに最上層として保護電極を設け
てもよい。なお、ホール輸送層は省略可能である。そし
て、電子注入電極は、蒸着、スパッタ法等、好ましくは
スパッタ法で成膜される仕事関数の小さい金属、化合物
または合金で構成される。また、電子注入電極が基板側
に成膜されるいわゆる逆積層としてもよい。

【0102】ホール注入電極としては、通常、基板側か
ら発光した光を取り出す構造であるため、透明な電極が
好ましく、ITO(錫ドーパ酸化インジウム)、IZO
(亜鉛ドーパ酸化インジウム)、ZnO、SnO₂、In
₂O₃等が挙げられるが、好ましくはITO(錫ドー
パ酸化インジウム)、IZO(亜鉛ドーパ酸化インジウ
ム)が好ましい。In₂O₃に対しSnO₂の混合比
は、1~20wt%が好ましく、さらには5~12wt%が
好ましい。In₂O₃に対しZnOの混合比は、12~
32wt%が好ましい。その他にSn、Ti、Pb等が酸
化物の形で、酸化物換算にして1wt%以下含まれてい
てもよい。

【0103】ホール注入電極は蒸着法等によっても形成
できるが、好ましくはスパッタ法により形成することが
好ましい。ITO、IZO電極の形成にスパッタ法を用
いる場合、好ましくはIn₂O₃にSnO₂やZnOを
ドーパしたターゲットを用いる。スパッタ法によりIT
O透明電極を成膜した場合、蒸着により成膜したものよ
り発光輝度の経時変化が少ない。スパッタ法としてはD
Cスパッタが好ましく、その投入電力としては、好まし
くは0.1~4W/cm²の範囲が好ましい。特にDCス
パッタ装置の電力としては、好ましくは0.1~10W
/cm²、特に0.2~5W/cm²の範囲である。また、成

膜レートは2～100nm/min、特に5～50nm/minの範囲が好ましい。

【0104】スパッタガスとしては特に限定するものではなく、Ar、He、Ne、Kr、Xe等の不活性ガス、あるいはこれらの混合ガスを用いればよい。このようなスパッタガスのスパッタ時における圧力としては、通常0.1～20Pa程度でよい。

【0105】ホール注入電極の厚さは、ホール注入を十分行える一定以上の厚さを有すれば良く、通常5～50nm、特に10～300nmの範囲が好ましい。

【0106】成膜される電子注入電極の構成材料としては、電子注入を効果的に行う低仕事関数の物質が好ましい。したがって、スパッタターゲットとしては、通常このような電子注入電極構成金属、合金を用いる。これらの仕事関数は4.5eV以下であり、特に仕事関数が4.0eV以下の金属、合金が好ましい。

【0107】スパッタ時のスパッタガスの圧力は、好ましくは0.1～5Paの範囲が好ましく、この範囲でスパッタガスの圧力を調節することにより、前記範囲のLi濃度のAlLi合金を容易に得ることができる。また、成膜中にスパッタガスの圧力を、前記範囲内で変化させることにより、上記Li濃度勾配を有する電子注入電極を容易に得ることができる。また、成膜ガス圧力と基板ターゲット間距離の積が20～65Pa・cmを満たす成膜条件にすることが好ましい。

【0108】スパッタガスは、通常のスパッタ装置に使用される不活性ガスや、反応性スパッタではこれに加えてN₂、H₂、O₂、C₂H₄、NH₃等の反応性ガスが使用可能である。

【0109】スパッタ法としてはRF電源を用いた高周波スパッタ法等も可能であるが、成膜レートの制御が容易であり、有機EL素子構造体へのダメージを少なくするためにはDCスパッタ法を用いることが好ましい。DCスパッタ装置の電力としては、好ましくは0.1～10W/cm²、特に0.5～7W/cm²の範囲である。また、成膜レートは5～100nm/min、特に10～50nm/minの範囲が好ましい。

【0110】電子注入電極薄膜の厚さは、電子注入を十分行える一定以上の厚さとすれば良く、1nm以上、好ましくは3nm以上とすればよい。また、その上限値には特に制限はないが、通常膜厚は3～500nm程度とすればよい。

【0111】本発明に用いられる有機EL素子は、電子注入電極の上、つまり有機層と反対側には保護電極を設けてもよい。保護電極を設けることにより、電子注入電極が外気や水分等から保護され、構成薄膜の劣化が防止され、電子注入効率が安定し、素子寿命が飛躍的に向上する。また、この保護電極は、非常に低抵抗であり、電子注入電極の抵抗が高い場合には配線電極としての機能も有する。この保護電極は、好ましくはAl、Alおよ

び遷移金属（ただしTiを除く）、Tiまたは窒化チタン(TiN)のいずれか1種または2種以上を含有する。

【0112】保護電極の厚さは、電子注入効率を確保し、水分や酸素あるいは有機溶媒の進入を防止するため、一定以上の厚さとすればよく、好ましくは50nm以上、さらに100nm以上、特に100～1000nmの範囲が好ましい。保護電極層が薄すぎると、本発明の効果が得られず、また、保護電極層の段差被覆性が低くなってしまい、端子電極との接続が十分ではなくなる。一方、保護電極層が厚すぎると、保護電極層の応力が大きくなるため、ダークスポットの成長速度が高くなってしまふ。なお、配線電極として機能させる場合の厚さは、電子注入電極の膜厚が薄いために膜抵抗が高く、これを補う場合には、通常100～500nm程度、その他の配線電極として機能される場合には100～300nm程度である。

【0113】電子注入電極と保護電極とを併せた全体の厚さとしては、特に制限はないが、通常100～1000nm程度とすればよい。

【0114】電極成膜後に、前記保護電極に加えて、SiO_x等の無機材料、テフロン、塩素を含むフッ化炭素重合体等の有機材料等を用いた保護膜を形成してもよい。保護膜は透明でも不透明であってもよく、保護膜の厚さは50～1200nm程度とする。保護膜は前記した反応性スパッタ法の他に、一般的なスパッタ法、蒸着法、PECVD法等により形成すればよい。

【0115】次に、本発明のEL素子に設けられる有機物層について述べる。

【0116】発光層は、ホール（正孔）および電子の注入機能、それらの輸送機能、ホールと電子の再結合により励起子を生成させる機能を有する。発光層には比較的電子的にニュートラルな化合物を用いることが好ましい。

【0117】ホール注入輸送層は、ホール注入電極からのホールの注入を容易にする機能、ホールを安定に輸送する機能および電子を妨げる機能を有し、電子注入輸送層は、陰電極からの電子の注入を容易にする機能、電子を安定に輸送する機能およびホールを妨げる機能を有するものであり、これらの層は、発光層に注入されるホールや電子を増大・閉じこめさせ、再結合領域を最適化させ、発光効率を改善する。

【0118】発光層の厚さ、ホール注入輸送層の厚さおよび電子注入輸送層の厚さは特に限定されず、形成方法によっても異なるが、通常、5～500nm程度、特に10～300nmとすることが好ましい。

【0119】ホール注入輸送層の厚さおよび電子注入輸送層の厚さは、再結合・発光領域の設計によるが、発光層の厚さと同程度もしくは1/10～10倍程度とすればよい。ホールもしくは電子の、各々の注入層と輸送層

を分ける場合は、注入層は1nm以上、輸送層は1nm以上とするのが好ましい。このときの注入層、輸送層の厚さの上限は、通常、注入層で500nm程度、輸送層で500nm程度である。このような膜厚については注入輸送層を2層設けるときも同じである。

【0120】本発明の有機EL素子の発光層には発光機能を有する化合物である蛍光性物質を含有させる。このような蛍光性物質としては、例えば、特開昭63-264692号公報に開示されているような化合物、例えばキナクリドン、ルブレン、スチリル系色素等の化合物から選択される少なくとも1種が挙げられる。また、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム等の8-キノリノールないしその誘導体を配位子とする金属錯体色素などのキノリン誘導体、テトラフェニルブタジエン、アントラセン、ペリレン、コロネン、12-フタロペリノン誘導体等が挙げられる。さらには、特開平8-12600号公報(特願平6-110569号)のフェニルアントラセン誘導体、特開平8-12969号公報(特願平6-114456号)のテトラアリールエテン誘導体等を用いることができる。

【0121】また、それ自体で発光が可能なホスト物質と組み合わせて使用することが好ましく、ドーパントとしての使用が好ましい。このような場合の発光層における化合物の含有量は0.01~10wt%、さらには0.1~5wt%であることが好ましい。ホスト物質と組み合わせて使用することによって、ホスト物質の発光波長特性を変化させることができ、長波長に移行した発光が可能になるとともに、素子の発光効率や安定性が向上する。

【0122】ホスト物質としては、キノリノラト錯体が好ましく、さらには8-キノリノールないしその誘導体を配位子とするアルミニウム錯体が好ましい。このようなアルミニウム錯体としては、特開昭63-264692号、特開平3-255190号、特開平5-70733号、特開平5-258859号、特開平6-215874号等を開示されているものを挙げることができる。

【0123】具体的には、まず、トリス(8-キノリノラト)アルミニウム、ビス(8-キノリノラト)マグネシウム、ビス(ベンゾ{f}-8-キノリノラト)亜鉛、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウムオキシド、トリス(8-キノリノラト)インジウム、トリス(5-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム、8-キノリノラトリチウム、トリス(5-クロロ-8-キノリノラト)ガリウム、ビス(5-クロロ-8-キノリノラト)カルシウム、5,7-ジクロロ-8-キノリノラトアルミニウム、トリス(5,7-ジブロモ-8-ヒドロキシキノリノラト)アルミニウム、ポリ[亜鉛(II)-ビス(8-ヒドロキシ-5-キノリニル)メタン]、等がある。

【0124】また、8-キノリノールないしその誘導体

のほかに他の配位子を有するアルミニウム錯体であってもよく、このようなものとしては、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(フェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(オルト-クレゾラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(メタ-クレゾラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(パラ-クレゾラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(オルト-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(メタ-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(パラ-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(2,3-ジメチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(2,6-ジメチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(3,4-ジメチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(3,5-ジメチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(3,5-ジ-tert-ブチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(2,6-ジフェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(2,4,6-トリフェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(2,3,6-トリメチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(2,3,5,6-テトラメチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(1-ナフトラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)(2-ナフトラト)アルミニウム(III)、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラト)(オルト-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラト)(パラ-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラト)(メタ-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラト)(3,5-ジメチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラト)(3,5-ジ-tert-ブチルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-4-エチル-8-キノリノラト)(パラ-クレゾラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-4-メトキシ-8-キノリノラト)(パラ-フェニルフェノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-5-シアノ-8-キノリノラト)(オルト-クレゾラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-6-トリフルオロメチル-8-キノリノラト)(2-ナフトラト)アルミニウム(III)等がある。

【0125】このほか、ビス(2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)- μ -オキソ-ビス(2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)、ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)- μ -オキソ-ビス(2,4-ジメチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)、ビス(4-エチル-2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)- μ -オキソ-ビス(4-エチル-2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-4-メトキシキノリノラト)アルミニウム(III)- μ -オキソ-ビス(2-メチル-4-メトキシキノリノラト)アルミニウム(III)、ビス(5-シアノ-2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)- μ -オキソ-ビス(5-シアノ-2-メチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)、ビス(2-メチル-5-トリフルオロメチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)- μ -オキソ-ビス(2-メチル-5-トリフルオロメチル-8-キノリノラト)アルミニウム(III)等であってもよい。

【0126】このほかのホスト物質としては、特開平8-12600号公報(特願平6-110569号)に記載のフェニルアントラセン誘導体や特開平8-12969号公報(特願平6-114456号)に記載のテトラアリールエテン誘導体なども好ましい。

【0127】発光層は電子注入輸送層を兼ねたものであってもよく、このような場合はトリス(8-キノリノラト)アルミニウム等を使用することが好ましい。これらの蛍光性物質を蒸着すればよい。

【0128】また、必要に応じて発光層は、少なくとも一種以上のホール注入輸送性化合物と少なくとも1種以上の電子注入輸送性化合物との混合層とすることも好ましく、この混合層中にドーパントを含有させることが好ましい。このような混合層における化合物の含有量は、0.01~20wt%、さらには0.1~15wt%とすることが好ましい。

【0129】混合層では、キャリアのホッピング伝導パスができるため、各キャリアは極性的に優勢な物質中を移動し、逆の極性のキャリア注入は起こり難くなり、有機化合物がダメージを受け難くなり、素子寿命がのびるという利点があるが、前述のドーパントをこのような混合層に含有させることにより、混合層自体のもつ発光波長特性を変化させることができ、発光波長を長波長に移行させることができるとともに、発光強度を高め、かつ素子の安定性を向上させることができる。

【0130】混合層に用いられるホール注入輸送性化合物および電子注入輸送性化合物は、各々、後述のホール注入輸送層用の化合物および電子注入輸送層用の化合物の中から選択すればよい。なかでも、ホール注入輸送層用の化合物としては、強い蛍光を持ったアミン誘導体、例えばホール輸送材料であるトリフェニルジアミン誘導

体、さらにはスチリルアミン誘導体、芳香族縮合環を持つアミン誘導体を用いるのが好ましい。

【0131】電子注入輸送性の化合物としては、キノリン誘導体、さらには8-キノリノールないしその誘導体を配位子とする金属錯体、特にトリス(8-キノリノラト)アルミニウム(A1q3)を用いることが好ましい。また、上記のフェニルアントラセン誘導体、テトラアリールエテン誘導体を用いるのも好ましい。

【0132】ホール注入輸送層用の化合物としては、強い蛍光を持ったアミン誘導体、例えば上記のホール輸送材料であるトリフェニルジアミン誘導体、さらにはスチリルアミン誘導体、芳香族縮合環を持つアミン誘導体を用いるのが好ましい。

【0133】この場合の混合比は、それぞれのキャリア移動度とキャリア濃度を考慮する事で決定するが、一般的には、ホール注入輸送性化合物の化合物/電子注入輸送機能を有する化合物の重量比が、1/99~99/1、さらには10/90~90/10、特には20/80~80/20程度となるようにすることが好ましい。

【0134】また、混合層の厚さは、分子層一層に相当する厚みから、有機化合物層の膜厚未満とすることが好ましく、具体的には1~85nmとすることが好ましく、さらには5~60nm、特には5~50nmとすることが好ましい。

【0135】また、混合層の形成方法としては、異なる蒸着源より蒸発させる共蒸着が好ましいが、蒸気圧(蒸発温度)が同程度あるいは非常に近い場合には、予め同じ蒸着ボード内で混合させておき、蒸着することもできる。混合層は化合物同士が均一に混合している方が好ましいが、場合によっては、化合物が島状に存在するものであってもよい。発光層は、一般的には、有機蛍光物質を蒸着するか、あるいは樹脂バインダー中に分散させてコーティングすることにより、発光層を所定の厚さに形成する。

【0136】また、ホール注入輸送層には、例えば、特開昭63-295695号公報、特開平2-191694号公報、特開平3-792号公報、特開平5-234681号公報、特開平5-239455号公報、特開平5-299174号公報、特開平7-126225号公報、特開平7-126226号公報、特開平8-100172号公報、EP0650955A1等に記載されている各種有機化合物を用いることができる。例えば、テトラアリールベンジジン化合物(トリアリールジアミンないしトリフェニルジアミン:TPD)、芳香族三級アミン、ヒドラゾン誘導体、カルバゾール誘導体、トリアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、アミノ基を有するオキサジアゾール誘導体、ポリチオフエン等である。これらの化合物は2種以上を併用してもよく、併用するときは別層にして積層したり、混合したりすればよい。

【0137】ホール注入輸送層をホール注入層とホール

輸送層とに分けて設層する場合は、ホール注入輸送層用の化合物のなかから好ましい組合せを選択して用いることができる。このとき、ホール注入電極（ITO等）側からイオン化ポテンシャルの小さい化合物の層の順に積層することが好ましい。また陽電極表面には薄膜性の良好な化合物を用いることが好ましい。このような積層順については、ホール注入輸送層を2層以上設けるときの同様である。このような積層順とすることによって、駆動電圧が低下し、電流リークの発生やダークスポットの発生・成長を防ぐことができる。また、素子化する場合、蒸着を用いているので1～10nm程度の薄い膜も、均一かつピンホールフリーとすることができるため、ホール注入層にイオン化ポテンシャルが小さく、可視部に吸収をもつような化合物を用いても、発光色の色調変化や再吸収による効率の低下を防ぐことができる。ホール注入輸送層は、発光層等と同様に上記の化合物を蒸着することにより形成することができる。

【0138】また、必要に応じて設けられる電子注入輸送層には、トリス（8-キノリノラト）アルミニウム（Alq3）等の8-キノリノールなしいその誘導体を配位子とする有機金属錯体などのキノリン誘導体、オキサジアゾール誘導体、ペリレン誘導体、ピリジン誘導体、ピリミジン誘導体、キノキサリン誘導体、ジフェニルキノノン誘導体、ニトロ置換フルオレン誘導体等を用いることができる。電子注入輸送層は発光層を兼ねたものであってもよく、このような場合はトリス（8-キノリノラト）アルミニウム等を使用することが好ましい。電子注入輸送層の形成は発光層と同様に蒸着等によればよい。

【0139】電子注入輸送層を電子注入層と電子輸送層とに分けて積層する場合には、電子注入輸送層用の化合物の中から好ましい組み合わせを選択して用いることができる。このとき、電子注入電極側から電子親和力の値の大きい化合物の順に積層することが好ましい。このような積層順については電子注入輸送層を2層以上設けるときの同様である。

【0140】基板に色フィルター膜や蛍光性物質を含む色変換膜、あるいは誘電体反射膜を用いて発光色をコントロールしてもよい。

【0141】色フィルター膜には、液晶ディスプレイ等で用いられているカラーフィルターを用いれば良いが、有機ELの発光する光に合わせてカラーフィルターの特性を調整し、取り出し効率・色純度を最適化すればよい。

【0142】また、EL素子材料や蛍光変換層が光吸収するような短波長の外光をカットできるカラーフィルターを用いれば、素子の耐光性・表示のコントラストも向上する。

【0143】また、誘電体多層膜のような光学薄膜を用いてカラーフィルターの代わりにしても良い。

【0144】蛍光変換フィルター膜は、EL発光の光を吸収し、蛍光変換膜中の蛍光体から光を放出させることで、発光色の色変換を行うものであるが、組成としては、バインダー、蛍光材料、光吸収材料の三つから形成される。

【0145】蛍光材料は、基本的には蛍光量子収率が高いものを用いれば良く、EL発光波長域に吸収が強いことが望ましい。実際には、レーザー色素などが適しており、ローダミン系化合物・ペリレン系化合物・シアニン系化合物・フタロシアニン系化合物（サブフタロ等も含む）ナフタロイミド系化合物・縮合環炭化水素系化合物・縮合複素環系化合物・スチリル系化合物・クマリン系化合物等を用いればよい。

【0146】バインダーは基本的に蛍光を消光しないような材料を選べば良く、フォトリソグラフィー・印刷等で微細なパターンニングが出来るようなものが好ましい。また、ITO、IZOの成膜時にダメージを受けないような材料が好ましい。

【0147】光吸収材料は、蛍光材料の光吸収が足りない場合に用いるが、必要の無い場合は用いなくても良い。また、光吸収材料は、蛍光性材料の蛍光を消光しないような材料を選べば良い。

【0148】ホール注入輸送層、発光層および電子注入輸送層の形成には、均質な薄膜が形成できることから真空蒸着法を用いることが好ましい。真空蒸着法を用いた場合、アモルファス状態または結晶粒径が0.2μm、特に0.1μm以下の均質な薄膜が得られる。結晶粒径が0.2μm、特に0.1μmを超えていると、不均一な発光となり、素子の駆動電圧を高くしなければならなくなり、電荷の注入効率も著しく低下する。

【0149】真空蒸着の条件は特に限定されないが、10⁻⁴Pa以下の真空度とし、蒸着速度は0.01～1nm/sec程度とすることが好ましい。また、真空中で連続して各層を形成することが好ましい。真空中で連続して形成すれば、各層の界面に不純物が吸着することを防げるため、高特性が得られる。また、素子の駆動電圧を低くしたり、ダークスポットの成長・発生を抑えたりすることができる。

【0150】これら各層の形成に真空蒸着法を用いる場合において、1層に複数の化合物を含有させる場合、化合物を入れた各ボートを個別に温度制御して共蒸着することが好ましい。

【0151】本発明に用いられる有機EL素子は、通常、直流駆動型のEL素子として用いられるが、交流駆動またはパルス駆動とすることもできる。印加電圧は、通常、2～20V程度とされる。

【0152】

【実施例】次に、実施例を示し本発明をより具体的に説明する。ここでは最も簡単な有機EL素子の例として、電子注入電極（金属薄膜）／有機層1／有機層2／ホー

ル注入電極（透明電極）／ガラス基板の構成とし、発光は有機層1と有機層2との界面で行われるものとする。このような有機EL素子について、従来のシミュレーションモデルと、本発明のシミュレーションモデルとにおいてそれぞれ演算〔市販のパソコンに数値計算プログラム（マセマティカ）を用い、上記シミュレーションモデ

ルを展開した〕し、得られた結果を実験データ（実測値）と比較した。

【0153】素子構成として、上記基本構成の有機EL素子を以下のような内容のものとした（測定はエリプソメトリーによる）。

金属面での振幅反射率 : $k = 1$
 有機層1 = Alq3 : 屈折率 $n_1 = 1.7$ 、膜厚 $d_1 = 70\text{nm}$
 有機層2 = TPD : 屈折率 $n_2 = 1.7$ 、膜厚 $d_2 = 60\text{nm}$
 ホール注入電極 = ITO : 屈折率 $n_3 = 1.9$ 、膜厚 d_3 変化した
 ガラス基板 : 屈折率 $n_4 = 1.5$
 発光物質の蛍光スペクトル : 図3に示す。
 視感度係数スペクトル : 図4に示す。

【0154】〔発光スペクトル〕

＜実施例：発明モデル＞本発明によるシミュレーションモデルは以下になる。

【0155】

【数59】

$$\begin{aligned} \phi_a[\lambda, n_1, d_1, n_2, d_2, n_3, d_3, n_4] &= \alpha_{Alq}[\lambda] \rho_a[\lambda, n_1, d_1, n_2, d_2, n_3, d_3, n_4] \\ \rho_a[\lambda, n_1, d_1, n_2, d_2, n_3, d_3, n_4] &= \left(1 + k^2 + 2k \cos \left[2\pi \left(\frac{211[n_1, d_1]}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \right) \\ &\quad \left(1 + 2r_{23}[n_2, n_3] \cos \left[2\pi \left(\frac{212[n_1, d_1, n_2, d_2]}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. 2r_{34}[n_3, n_4] \cos \left[2\pi \left(\frac{213[n_1, d_1, n_2, d_2, n_3, d_3]}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. 2r_{12}[n_1, n_2] \right. \\ &\quad \left. \left(k^2 \cos \left[\frac{2\pi(211[n_1, d_1] + 211[n_1, d_1])}{\lambda} \right] + k^3 \cos \left[2\pi \left(\frac{211[n_1, d_1]}{\lambda} - \frac{1}{2} \right) \right] \right) \right) \end{aligned}$$

$$11[n_1, d_1] = n_1 \times d_1$$

$$12[n_1, d_1, n_2, d_2] = n_1 \times d_1 + n_2 \times d_2$$

$$13[n_1, d_1, n_2, d_2, n_3, d_3] = n_1 \times d_1 + n_2 \times d_2 + n_3 \times d_3$$

$$r_{12}[n_1, n_2] = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}$$

$$r_{23}[n_2, n_3] = \frac{n_2 - n_3}{n_2 + n_3}$$

$$r_{34}[n_3, n_4] = \frac{n_3 - n_4}{n_3 + n_4}$$

【0156】＜比較例：従来モデル＞従来のシミュレーションモデルは以下になる。

【0157】

【数60】

$$\begin{aligned} \phi_b[\lambda, n_1, d_1] &= \alpha_{Alq}[\lambda] \rho_b[\lambda, n_1, d_1] \\ \rho_b[\lambda, n_1, d_1] &= 1 + k^2 + 2k \cos \left[2\pi \left(\frac{2n_1 d_1}{\lambda} + \frac{1}{2} \right) \right] \end{aligned}$$

【0158】上記各シミュレーションモデルにおいて、ホール注入電極（ITO）の膜厚を50～200nmに変

化させた場合について演算した。得られた結果を図5～図11に示す。図中、破線は従来例、実線は実施例を示

し、縦軸は任意量である。

【0159】＜対照例：実測モデル＞実際に上記構成でITO電極の厚み d_3 を変化させた有機EL素子を、蒸着法により作製した。得られた各有機EL素子について、分光輝度計を用いて発光スペクトルを測定した。得られた結果を図12～図18に示す。

【0160】図12～図18から明らかなように、ITOの膜厚により実測モデルのスペクトルは変化し、その変化は本発明のモデルとよく一致している。ITOは電極のため、その膜厚が変化しても電気的変化は少ないので、原理的には発光スペクトル変化は光学変調の効果となる。

【0161】〔発光輝度〕

＜実施例：発明モデル＞本発明によるシミュレーションモデルは以下になる。

【0162】

【数61】

$$\eta_a[n1, d1, n2, d2, n3, d3, n4] = \int_{300}^{800} \phi_a[\lambda, n_1, d_1, n_2, d_2, n_3, d_3, n_4] \cdot \theta_{(\lambda)} d\lambda$$

【0163】＜比較例：従来モデル＞従来のシミュレーションモデルは以下になる。

【0164】

【数62】

$$\eta_b[n1, d1] = \int_{300}^{800} \phi_b(\lambda, n_1, d_1) \cdot \theta_{(\lambda)} d\lambda$$

【0165】上記各シミュレーションモデルにおいて、ホール注入電極（ITO）の膜厚を0～200nmおよび0～1000nmの間で変化させた場合について演算した。得られた結果を図19、図20に示す。図中、破線は従来例、実線は実施例を示す。

【0166】＜対照例：実測モデル＞実際に上記構成でITO電極の厚み d_3 を50～200nmに変化させた有機EL素子を、蒸着法により作製した。得られた各有機EL素子について、分光輝度計を用いて発光輝度を測定した。得られた結果を図21に示す。

【0167】図21から明らかなように、ITOの膜厚により実測モデルの輝度は変化し、その変化は本発明のモデルとよく一致している。ITOは電極のため、その膜厚が変化しても電気的変化は少ないので、原理的には発光輝度変化は光学変調の効果となる。

【0168】以上のシミュレーションモデルと実測値との比較結果から、本発明のモデルは、従来のモデルと比較して、かに正確になっていることがわかる。そして、金属面以外の反射光を定量的に考慮することで正確なシミュレーションを行うことができ、有機EL発光素子の発光スペクトルを光学的に変調する際、所望の変調を得

る素子の光学的構成を決定することができる。これに対して、従来の簡単な近似式では、金属面以外の反射光による変調を無視しているため、その部分の誤差を含むこととなる。また、従来の定性的な考察のみでは、スペクトルの変化を定量的に予測できないばかりか、白色光のような各種の波長が混在した場合には適用することができない。

【0169】上記例ではAlq3を用いた有機EL素子の簡単な構成のものについてシミュレーションを行ったが、それ以外の系について適用可能なことはない。発光ポイントは、局在発光の場合について検討したが、分布を持つ（異なる発光域での発光には相関がないとする。）場合には、それぞれの微少発光域からの寄与を単に積分すればよい。その後の取り扱いは同様である。

【0170】次に、今回のシミュレーション結果で判明した点について説明する。

【0171】輝度はホール注入電極の膜厚 d_3 に応じて変化し、だんだん収束する。これは、 n_3 と n_4 の屈折率の差が大きいため、この界面での反射が支配的であることを示す。しかし、例えばそれ以外の界面での反射も大きいときは、その光学距離にも依存してくることは容易に推察できる。

【0172】以上のシミュレーションは、今回のような構成に限定されるものではなく、例えば、基板／電子注入電極／有機層／透明電極／光学層といった構成を有する素子にも適用可能である。

【0173】以上の結果から、有機EL素子の光学的構成と発光特性の関係が計算できることが判明した。従って、光学特性のバラツキと、光学膜厚のバラツキとの関係がわかる。上記のシミュレーションモデルにより、所望の光学バラツキにするための、素子構成への膜厚バラツキの要求値が定まる。

【0174】例えば、上記構成例で、 $d_3 = 100\text{nm}$ （ITO膜厚）である場合に、輝度のバラツキを±5%以内に抑えるためには、膜厚のバラツキを±20%以内に抑える必要のあることがわかる。また、 $d_3 = 70\text{nm}$ 、 200nm である場合には、輝度のバラツキを±5%以内に抑えるには、膜厚のバラツキを±10%以内に抑える必要のあることがわかる。膜厚バラツキに直すと $d_3 = 70\text{nm}$ で±13%、 200nm で±5%と、膜厚が薄い方が有利となる。一般に、成膜装置での膜厚バラツキは、膜厚に対して±5%程度なので、この場合には $d_3 = 70\text{nm}$ での使用が好ましく、輝度のバラツキを±5%以内に抑えるには、前記ITO透明電極と有機層との光学膜厚の合計を $1.9 \times 200\text{nm}$ 以下とする必要があることがわかる。

【0175】上記計算例は一例にすぎない。従って、他の構成膜厚が変化する場合にはそれに対応した値となる。一般に、膜厚が薄いほど絶対値での膜厚バラツキは

小さいので、薄い膜厚での構成がばらつき低減という意味では重要である。

【0176】上記シミュレーションとそのフィードバックは、材料や光学系が異なる系でも、それに対応する式を構成し、演算することで拡張することが可能である。例えば、上記構成例ではガラス基板上にITO透明導電膜／有機層が形成されている場合について検討したが、ガラス基板上にポリイミドやレジスト等がコートされたバッファ層Nrがあり、その上にさらにITO透明導電膜／有機層／電子注入電極が構成されている場合についての輝度バラツキを検討することもできる。

【0177】一般に、バッファ層Nrと透明導電膜の屈折率は近く、1.8～2.0程度であるが、ガラスは通常1.5程度である。従って、ガラスとバッファ層Nr界面での反射光が変調を引き起こす。、輝度バラツキを抑制するためにはバッファ層Nrの膜厚バラツキが重要な要素となり、正確に数十nm以内に抑える必要がある。しかし、一般的なレジストやポリイミドでは、それが極めて難しい。ところで、今回の検討結果から、変調による輝度の変化はd3が大きくなると収束することがわかっている。そこで、この場合では、バッファ層Nrの膜厚を十分に厚くしてもよい結果が得られることがわかる。そして、上記シミュレーション結果をから、この例の場合にはバッファ層の膜厚を700nm以上とすればよいことがわかる。輝度のバラツキを±5%以内に抑えるには、前記ITO透明電極と、バッファ層と、有機層との光学膜厚の合計を $1.9 \times 200\text{nm}$ 以下とする必要があることがわかる。

【0178】

【発明の効果】以上のように、本発明によれば、従来検討されていた以外の反射光を簡単に近似することで、一般的な任意の構造を有する有機EL素子から外部に放出されるスペクトルを正確に予測し、所望のスペクトルを得るための素子設計を可能にする有機EL素子のシミュレーション方法および装置を提供できる。

【0179】また、多くの反射面を有する構造でも効率的な光の取り出しが可能な構造を実現可能な有機EL素子のシミュレーション方法および装置を提供できる。

【0180】また、光学的なバラツキを低減可能な素子構成を実現可能な有機EL素子のシミュレーション方法および装置を提供できる。

【0181】また、シミュレーションの結果から、光学的なバラツキを低減できる素子構成とした有機EL素子を提供できる。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明のシミュレーションモデルである有機EL素子の概念図である。

【図2】図1の有機EL素子の発光領域が一定の幅を有する場合を示した概念図である。

【図3】実施例で使用した有機EL素子の発光物質の蛍光スペクトルを示した図である。

【図4】実施例において使用した視感度係数のスペクトルを示した図である。

【図5】ITOの膜厚を50nmとした場合の、実施例と比較例の発光スペクトルを示した図である。

【図6】ITOの膜厚を75nmとした場合の、実施例と比較例の発光スペクトルを示した図である。

【図7】ITOの膜厚を100nmとした場合の、実施例と比較例の発光スペクトルを示した図である。

【図8】ITOの膜厚を125nmとした場合の、実施例と比較例の発光スペクトルを示した図である。

【図9】ITOの膜厚を150nmとした場合の、実施例と比較例の発光スペクトルを示した図である。

【図10】ITOの膜厚を175nmとした場合の、実施例と比較例の発光スペクトルを示した図である。

【図11】ITOの膜厚を200nmとした場合の、実施例と比較例の発光スペクトルを示した図である。

【図12】ITOの膜厚を50nmとした場合の、実測値の発光スペクトルを示した図である。

【図13】ITOの膜厚を75nmとした場合の、実測値の発光スペクトルを示した図である。

【図14】ITOの膜厚を100nmとした場合の、実測値の発光スペクトルを示した図である。

【図15】ITOの膜厚を125nmとした場合の、実測値の発光スペクトルを示した図である。

【図16】ITOの膜厚を150nmとした場合の、実測値の発光スペクトルを示した図である。

【図17】ITOの膜厚を175nmとした場合の、実測値の発光スペクトルを示した図である。

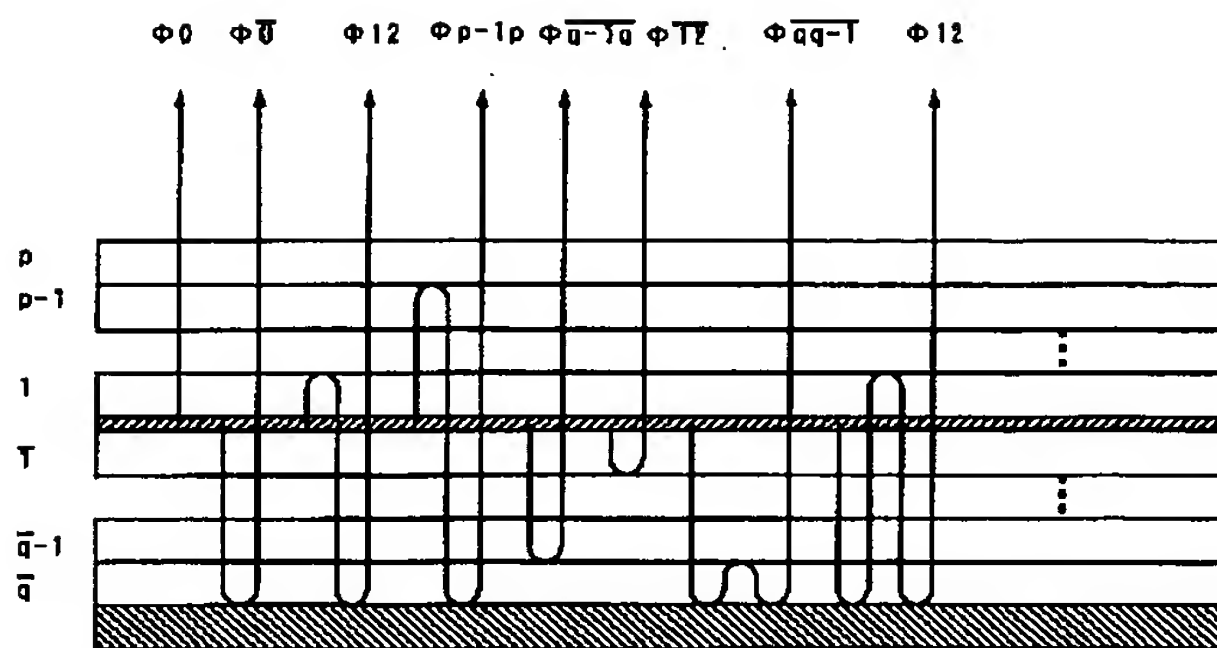
【図18】ITOの膜厚を200nmとした場合の、実測値の発光スペクトルを示した図である。

【図19】ITOの膜厚を0～200nmと変化させた場合の、実施例と比較例の発光輝度を示した図である。

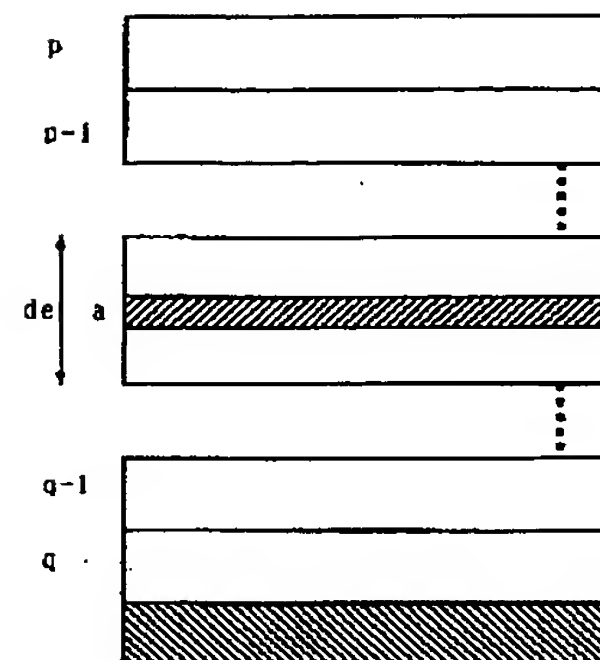
【図20】ITOの膜厚を0～1000nmと変化させた場合の、実施例と比較例の発光輝度を示した図である。

【図21】ITOの膜厚を50～200nmと変化させた場合の、実測値の発光輝度を示した図である。

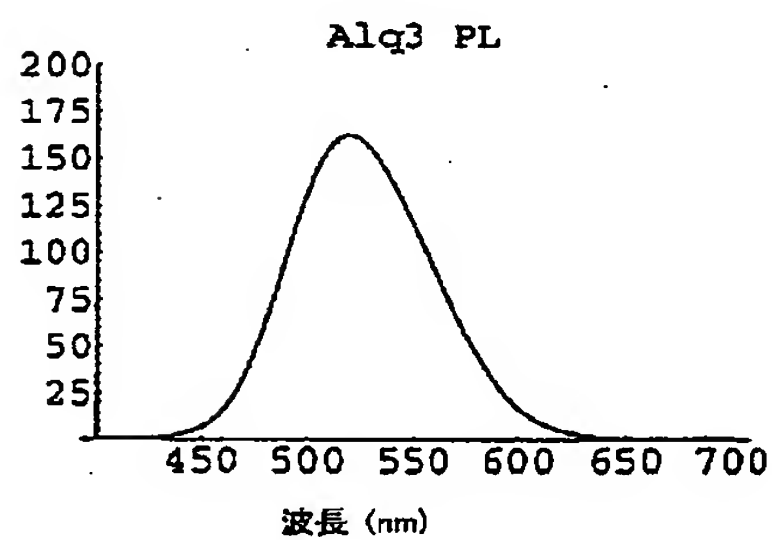
【図1】



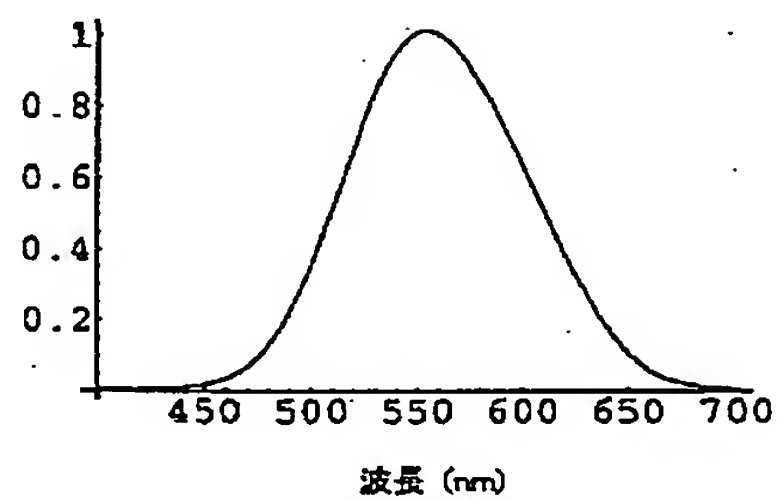
【図2】



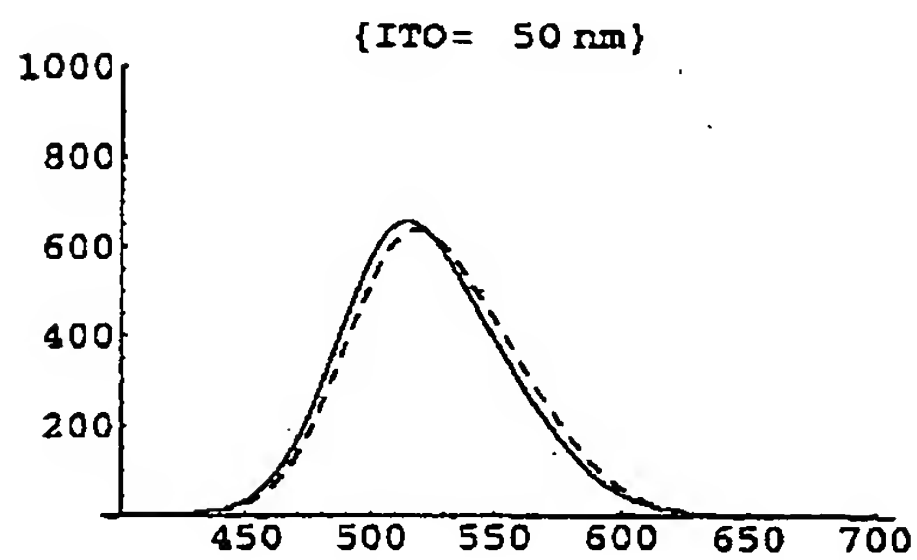
【図3】



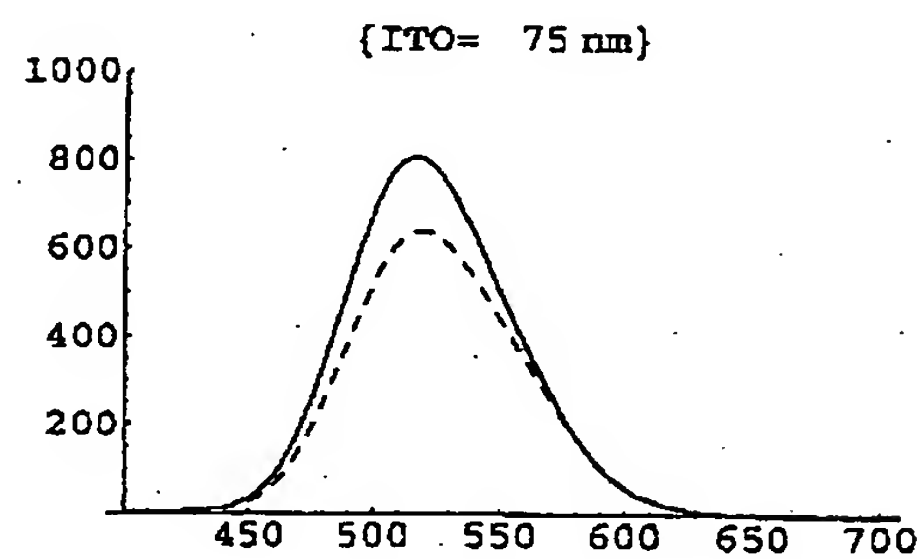
【図4】



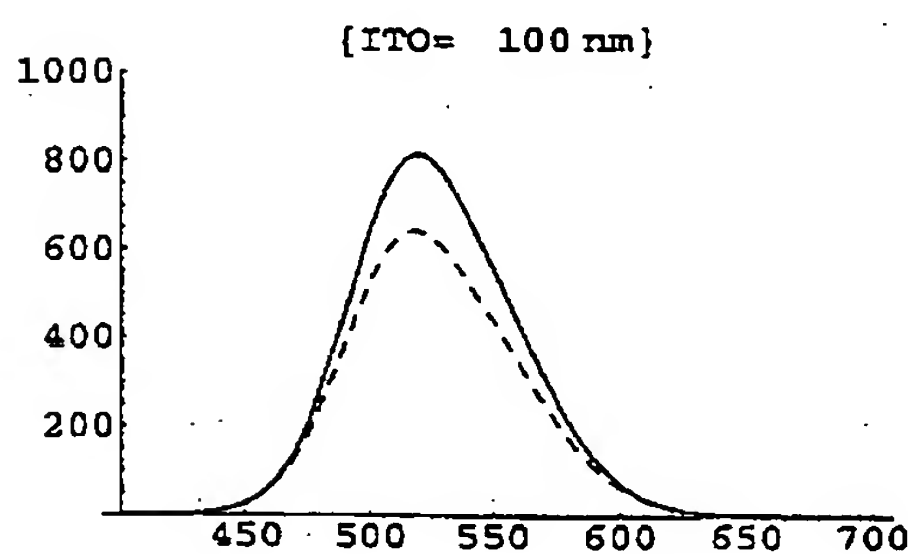
【図5】



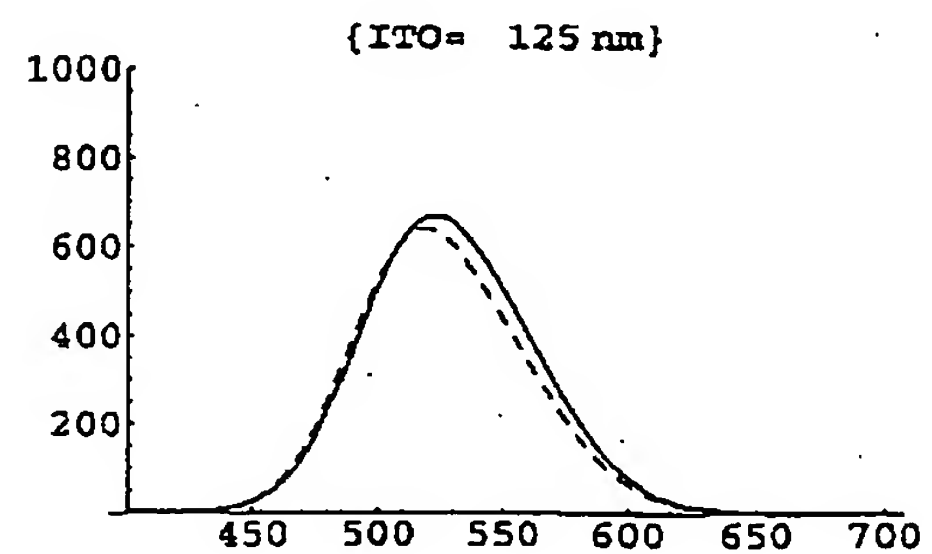
【図6】



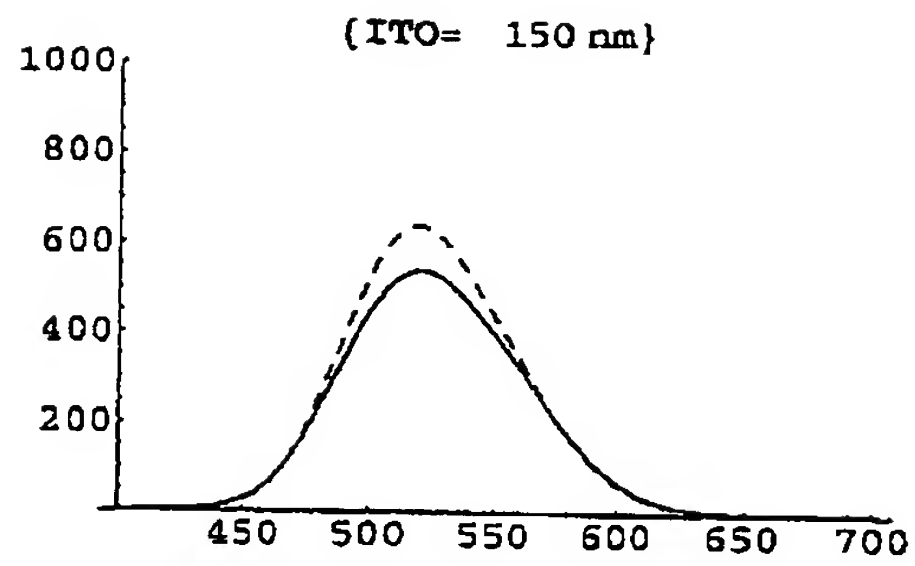
【図7】



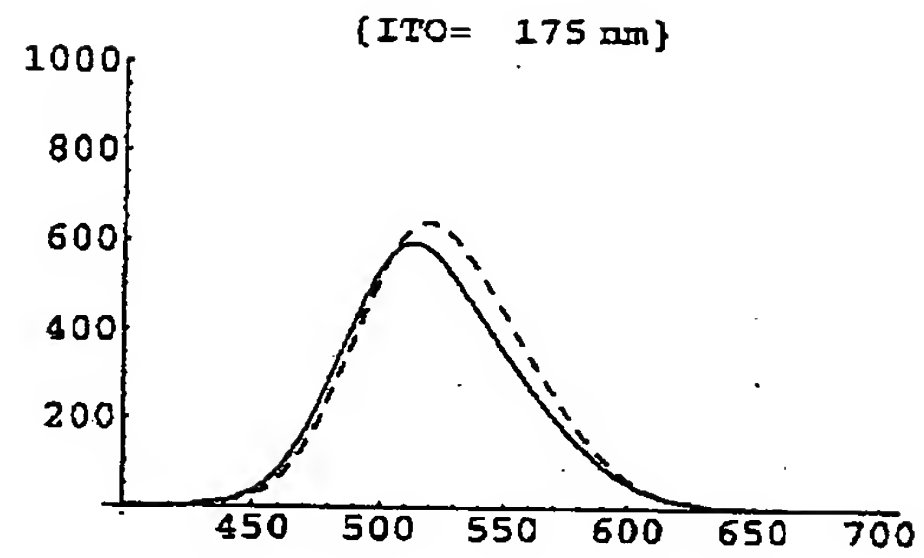
【図8】



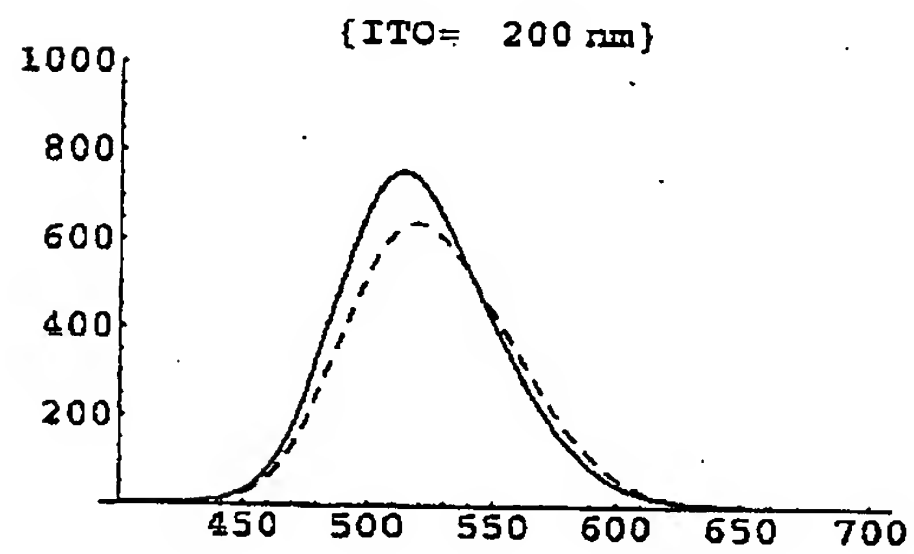
【図9】



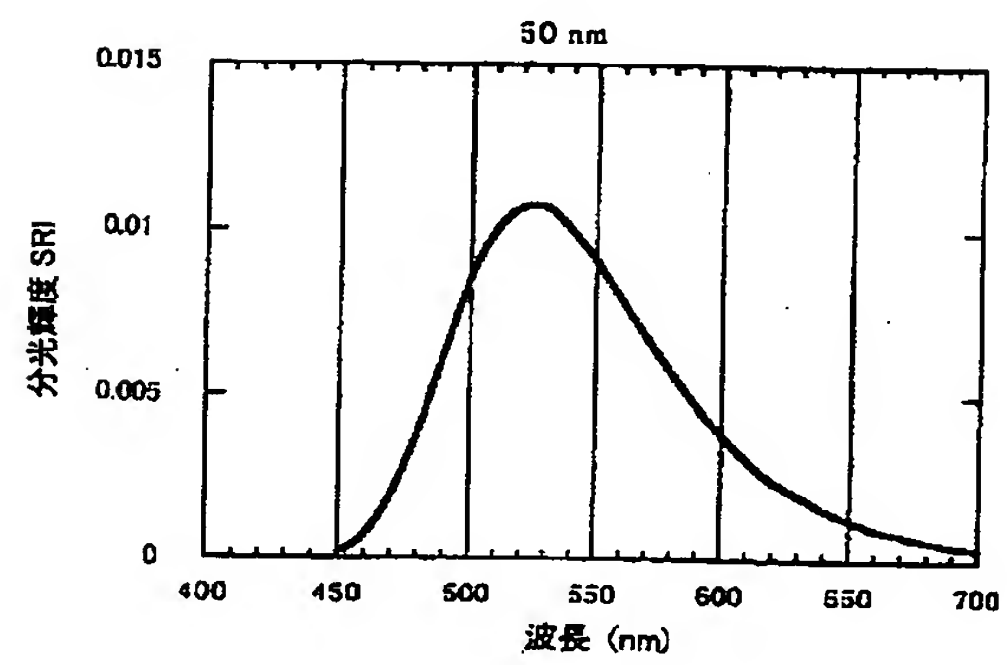
【図10】



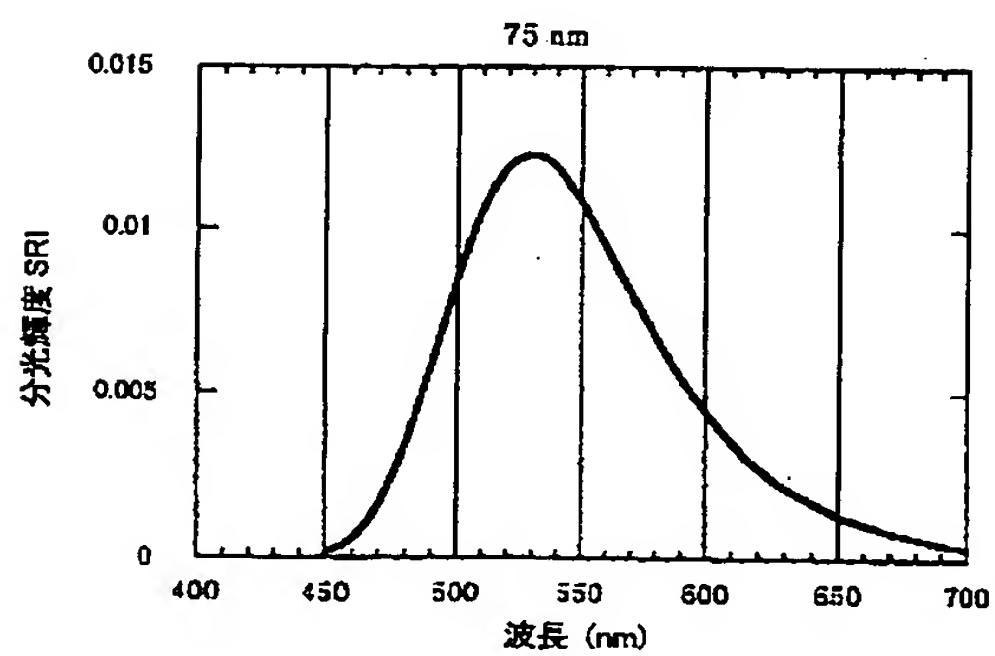
【図11】



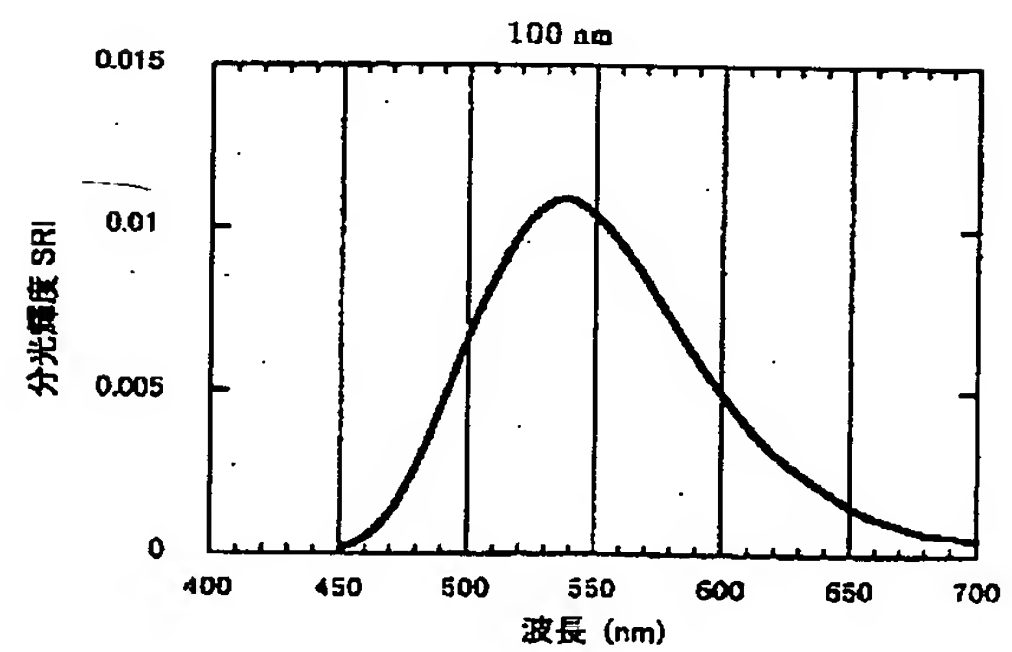
【図12】



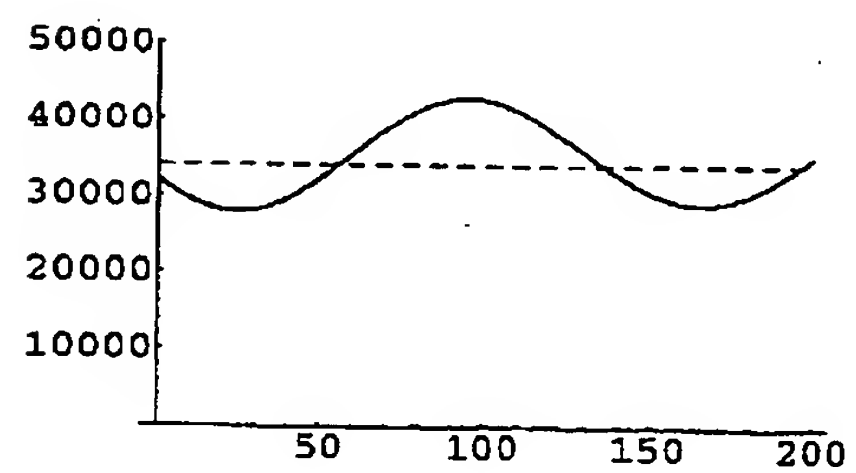
【図13】



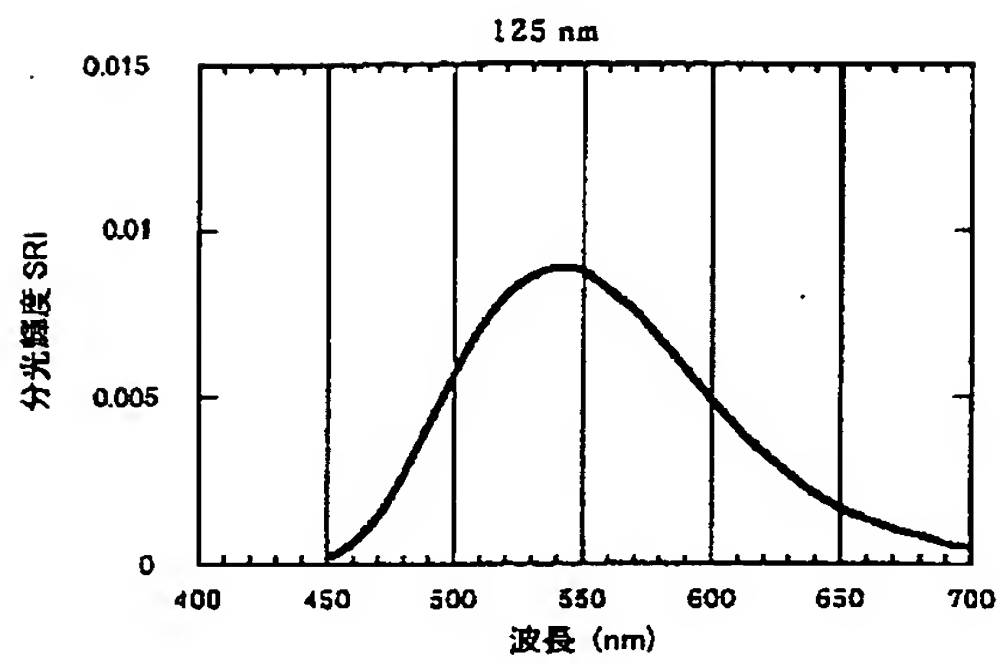
【図14】



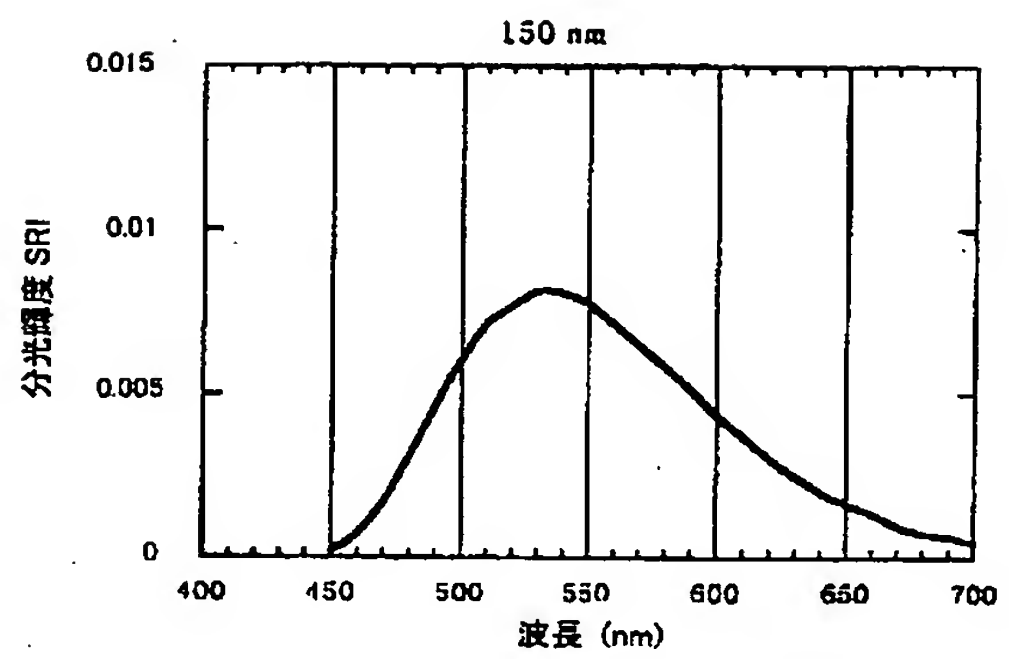
【図19】



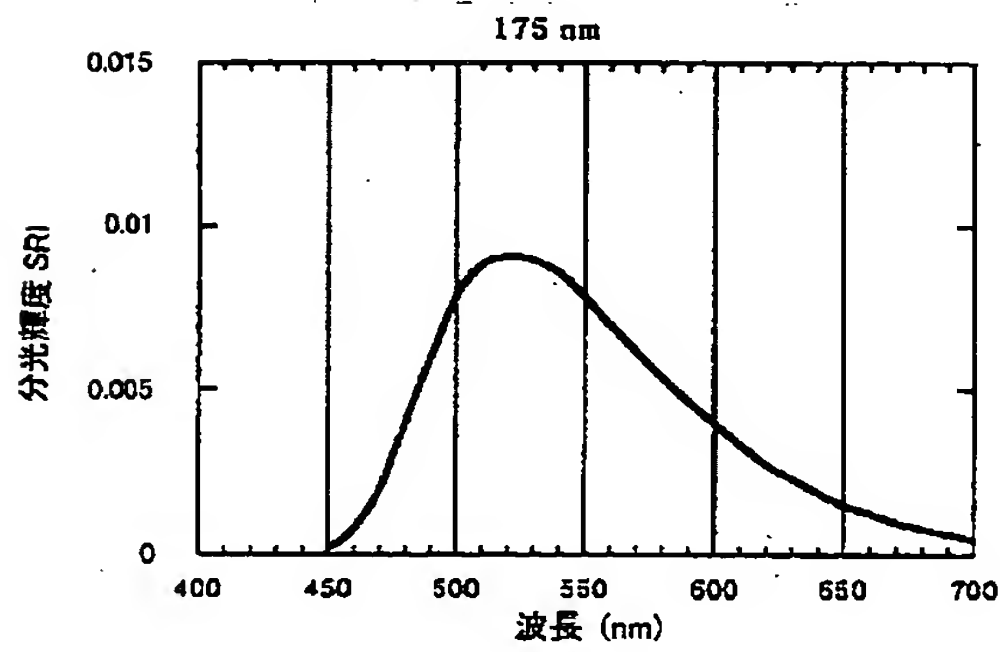
【図15】



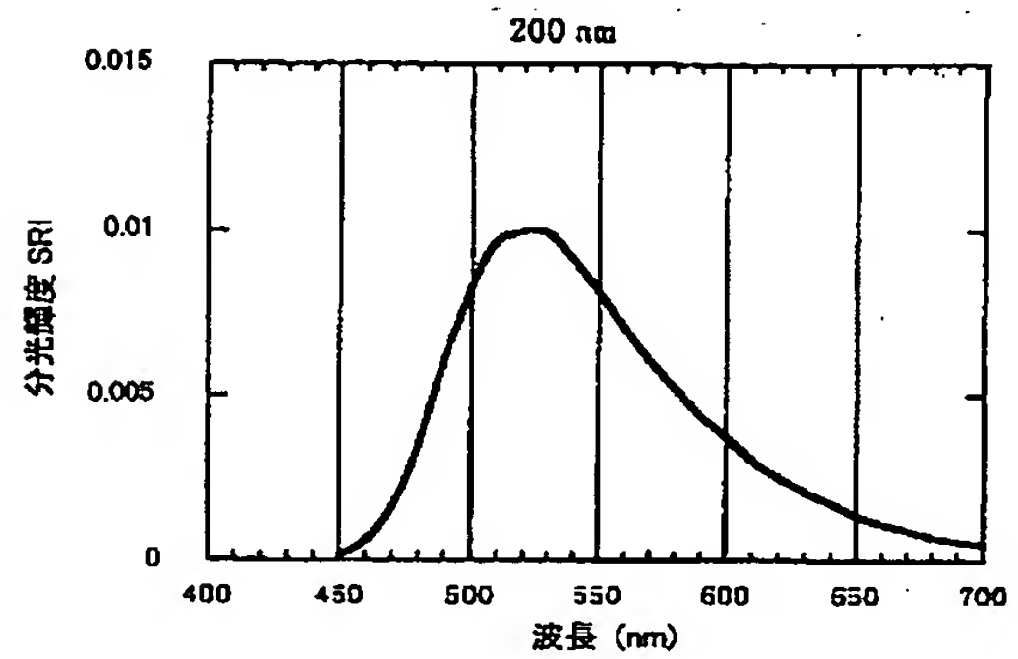
【図16】



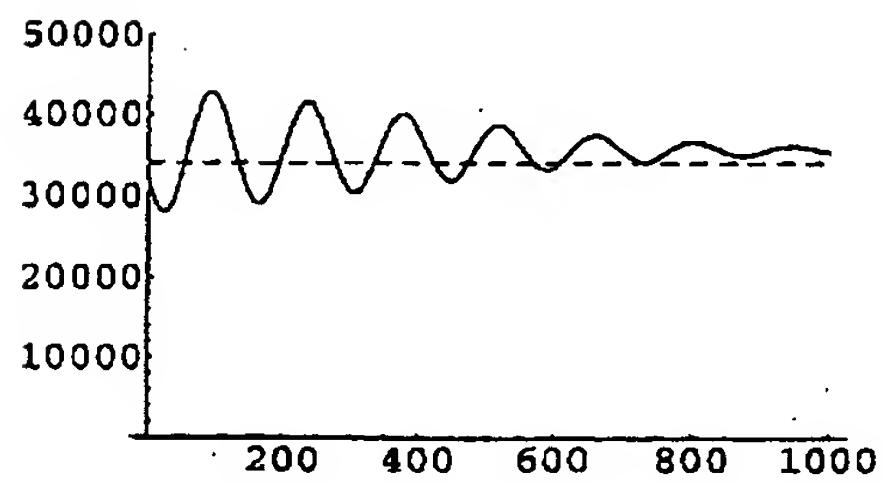
【図17】



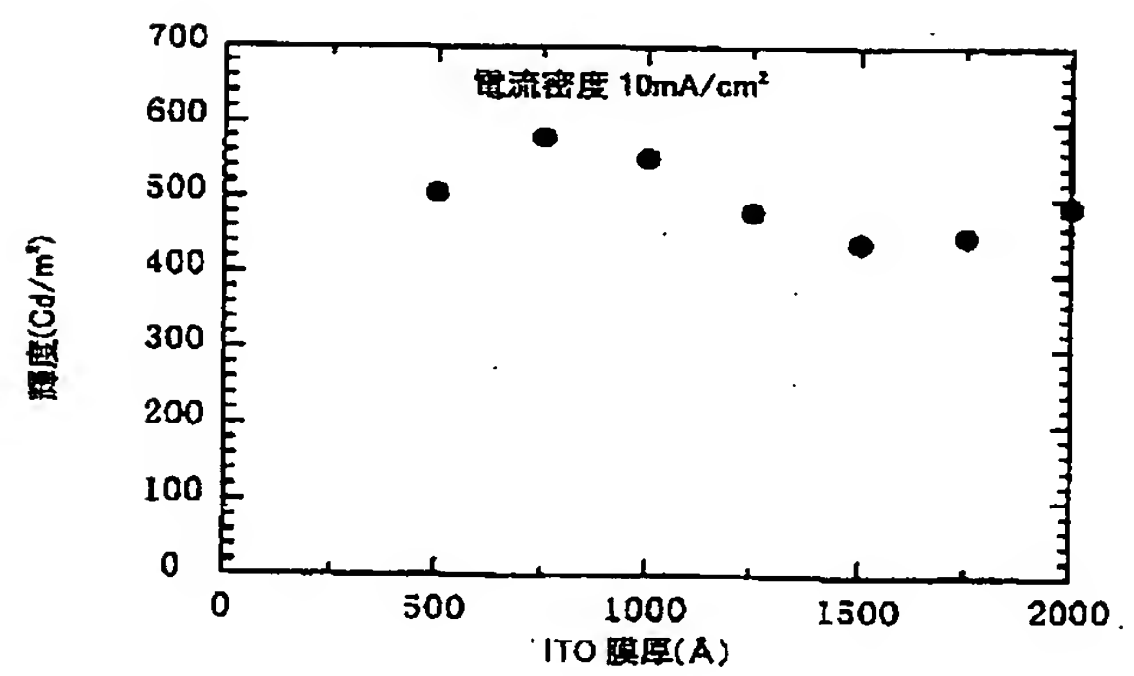
【図18】



【図20】



【図21】



THIS PAGE BLANK (USPTO)

**This Page is Inserted by IFW Indexing and Scanning
Operations and is not part of the Official Record**

BEST AVAILABLE IMAGES

Defective images within this document are accurate representations of the original documents submitted by the applicant.

Defects in the images include but are not limited to the items checked:

- ☐ **BLACK BORDERS**
- ☐ **IMAGE CUT OFF AT TOP, BOTTOM OR SIDES**
- ☐ **FADED TEXT OR DRAWING**
- ☐ **BLURRED OR ILLEGIBLE TEXT OR DRAWING**
- ☐ **SKEWED/SLANTED IMAGES**
- ☐ **COLOR OR BLACK AND WHITE PHOTOGRAPHS**
- ☐ **GRAY SCALE DOCUMENTS**
- ☐ **LINES OR MARKS ON ORIGINAL DOCUMENT**
- ☐ **REFERENCE(S) OR EXHIBIT(S) SUBMITTED ARE POOR QUALITY**
- ☐ **OTHER:** _____

IMAGES ARE BEST AVAILABLE COPY.

As rescanning these documents will not correct the image problems checked, please do not report these problems to the IFW Image Problem Mailbox.

THIS PAGE BLANK (USPTO)